

**NUMERICKÉ MODELOVÁNÍ
ELEKTRICKÝCH A ELASTICKÝCH POLÍ
VE FEROELEKTRICKÝCH MATERIÁLECH**

DISERTAČNÍ PRÁCE

Ing. Jiřina Královcová

8. listopadu 2004

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem disertační práci vypracovala zcela samostatně s použitím uvedené literatury.

Ing. Jiřina Královcová

Abstract

The thesis deals with the suggestion of models of ferroelectric material properties. Three models were developed to support simulation of mentioned materials. The first model provides evaluation of electric field within heterogeneous anisotropic dielectric material exposed external electric loading. The second model provides evaluation of elastic field within heterogeneous anisotropic elastic material exposed external mechanic loading. The third model provides evaluation of electric and elastic field within an ferroelectric material with internal domain structure exposed external electric and mechanic loading. The models are based on a mixed and hybrid formulation of initial physical description. The finite element method is employed to provide the approximation.

The first pivotal part of the thesis provides physical description of considered materials. The second pivotal part is focused on the model formulation and their approximation using finite elements. The third pivotal part describes the problems related to the computer implementation of formulated models and provides results of some fundamental tasks simulated by the models.

Obsah

1	Úvod	9
I	Fyzikální popis	11
2	Fyzikální vlastnosti feroelektrických látek	12
2.1	Elektrická indukce a polarizace	12
2.2	Napětí a deformace	15
2.3	Piezoelektrické vlastnosti	16
2.4	Piezoelektrické stavové rovnice	17
2.5	Maticový tvar rovnic	19
2.6	Transformace materiálových tenzorů	21
2.7	Vztah struktury krystalů a materiálových tenzorů	22
2.8	Vlastnosti feroelektrických látek	23
2.8.1	Piezoelektrický, pyroelektrický a feroelektrický jev	23
2.8.2	Doménová struktura feroelektrických látek	23
2.8.3	Fyzikální popis feroelektrik	24
II	Formulace a aproximace navržených modelů	25
3	Cíle a metody práce	26
3.1	Základní cíle	26
3.2	Použitá matematická formulace úlohy	27
3.3	Modelovaná oblast a její rozklad	28
4	Prostory funkcí	30
4.1	Prostory integrovatelných funkcí	30
4.2	Aproximační prostory	33
5	Model elektrického pole	35
5.1	Matematická formulace úlohy	35
5.2	Smíšená hybridní formulace úlohy	36
5.3	Aproximace úlohy	38
5.4	Aplikace metody konečných prvků	39

5.4.1	Prostory konečných prvků	39
5.4.2	Generování bázových funkcí prostoru $\mathbf{RT}^0(e)$	40
5.4.3	Stavová matice soustavy	41
5.4.4	Algoritmus sestavení stavové matice	43
5.4.5	Vektor řešení	46
6	Model elastického pole	47
6.1	Matematická formulace úlohy	47
6.2	Smíšená hybridní formulace úlohy	48
6.3	Aproximace úlohy	50
6.4	Aplikace metody konečných prvků	50
6.4.1	Prostory konečných prvků	51
6.4.2	Stavová matice soustavy	52
6.4.3	Algoritmus sestavení stavové matice	53
6.4.4	Vektor řešení	55
6.4.5	Generování báze prostoru tenzorových funkcí	56
7	Model elektroelastického pole	58
7.1	Matematická formulace úlohy	58
7.2	Smíšená hybridní formulace	59
7.3	Aproximace úlohy	61
7.4	Aplikace metody konečných prvků	62
III	Implementace a testování navržených modelů	65
8	Počítačová implementace	66
8.1	Základní datové struktury	66
8.2	Struktura a datové toky výpočtu	67
8.3	Původní algoritmy	70
8.3.1	Mapování sítě	71
8.3.2	Sousednost elementů	71
8.3.3	Mapování hran	74
8.4	Formáty vstupních a výstupních souborů	74
9	Testování navržených modelů	76
9.1	Testování modelu elektrického pole	76
9.2	Testování modelu elastického pole	80
9.3	Testování modelu elektroelastického pole	82
9.4	Výpočet elektrického pole ve feroelektrickém krystalu	83
10	Závěr	86

Seznam použitých symbolů

Fyzikální symboly

Symbol		Význam
E	Vm^{-1}	vektor intenzity elektrického pole
D	Cm^{-2}	vektor elektrické indukce
P	Cm^{-2}	vektor elektrické polarizace
P⁰	Cm^{-2}	spontánní polarizace
T	Pa	tenzor mechanického napětí
S	1	tenzor mechanické deformace
S⁰	1	spontánní deformace
φ	V	elektrický potenciál
u	m	vektor mechanického posunutí
w_E	Jm^{-3}	hustota elektrostatické energie
W_E	J	elektrostatická energie
w_M	Jm^{-3}	hustota elastické energie
W_M	J	elastická energie
ϱ	Cm^{-3}	objemová hustota elektrického náboje
σ	Cm^{-2}	plošná hustota elektrického náboje
ε_0	$CV^{-1}m^{-1}$	permitivita vakua, $\varepsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} CV^{-1}m^{-1}$
ε	$CV^{-1}m^{-1}$	tenzor dielektrických koeficientů
ε_r	1	tenzor relativních dielektrických koeficientů
κ	$CV^{-1}m^{-1}$	tenzor dielektrické susceptibility
β	VmC^{-1}	tenzor dielektrické impermeability
s	mN^{-1}	tenzor elastických koeficientů
c	Nm^{-1}	tenzor elastických modulů
d	mV^{-1}	tenzor piezoelektrických koeficientů
g	m^2C^{-1}	tenzor piezoelektrických koeficientů
h	Vm^{-1}	tenzor piezoelektrických modulů
e	Cm^{-2}	tenzor piezoelektrických modulů

Matematické symboly

Symbol Význam

Ω	modelovaná oblast
$\partial\Omega$	hranice oblasti Ω
$\bar{\Omega}$	uzávěr oblasti Ω , $\bar{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega$
τ_h	rozklad oblasti Ω
e	podoblast (element) rozkladu τ_h
f	stěna rozkladu τ_h
Γ_D	množina všech vnějších stěn rozkladu τ_h , na kterých je dána Dirichletova okrajová podmínka
Γ_N	množina všech vnějších stěn rozkladu τ_h , na kterých je dána Neumanova okrajová podmínka
Γ_h	množina všech nedirichletovských stěn rozkladu τ_h
f^e	restrikce funkce f na podoblast e
\mathbf{n}	vektor vnější normály
δ_{ij}	Croneckerova delta $\delta_{ij} = 1$ pro $i = j$, jinak $\delta_{ij} = 0$
$L^2(\Omega)$	lineál funkcí integrovatelných s druhou mocninou v oblasti Ω

Použité konvence

V textu je pro reprezentaci souřadnic v trojrozměrném (3D) nebo dvourozměrném (2D) prostoru používán vektor \mathbf{x} se složkami x_i

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3), \quad \text{popřípadě} \quad \mathbf{x} = (x_1, x_2) .$$

V některých částech textu je potom pro specifikaci jednotlivých složek vektoru souřadnic ve 2D použito symbolů x, y

$$\mathbf{x} = (x, y) .$$

Obdobně pro rozlišení jednotlivých složek vektorových a tenzorových veličin jsou používány číselné indexy (1,2,3), popřípadě ve 2D i písmenné indexy (x,y).

Pro zápis tenzorových a v některých případech i vektorových rovnic je v textu používána Einsteinova sčítací konvence. Například vztah mezi tenzorem deformace a tenzorem napětí (ve 3D) použitím této konvence je zapsán rovnicí

$$S_{ij} = s_{ijkl}T_{kl},$$

která je zkráceným zápisem rovnice

$$S_{ij} = \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 s_{ijkl}T_{kl} .$$

Pro zkrácení a zpřehlednění zápisu integrálních forem počítaných na ploše a na křivce jsou tyto odlišeny tvarem použitých závorek následujícím způsobem

$$\begin{aligned} (f, g)_{\Omega} &= \int_{\Omega} f(x)g(x)dx, \\ \langle f, g \rangle_{\Gamma} &= \int_{\Gamma} f(x)g(x)dl, \end{aligned}$$

kde Ω je oblast v E_2 , Γ je křivka v E_2 a $x = (x_1, x_2)$ je bod v E_2 .

Kapitola 1

Úvod

V posledních šedesáti letech byl zaznamenán významný pokrok v oblasti fyziky *feroelektrických látek* – dielektrických látek, které v určitém teplotním oboru vykazují *spontánní polarizaci*. Tyto látky mají v současné době významné aplikace v nejrůznějších technických oborech, a proto je jejich studiu věnována značná pozornost.

Feroelektrika se vyznačují již zmíněnou spontánní polarizací, jejíž směr je možné změnit vnějším elektrickým polem. Ve feroelektrickém materiálu musí tedy existovat několik základních směrů spontánní polarizace. Ve feroelektrickém krystalu lze potom pozorovat takzvané *domény* – oblasti krystalu, v nichž má spontánní polarizace jednotný směr a *doménové stěny* – hranice mezi doménami. Vlivem vnějšího elektrického pole může docházet k pohybům doménových stěn a tedy i ke změnám vnitřní doménové struktury krystalu, což má za následek změnu efektivních vlastností příslušného materiálu.

Feroelektrika patří do širší skupiny *piezoelektrických látek*, které se vyznačují elektromechanickým spřaženým efektem – vnějším mechanickým zatížením je v těchto materiálech indukována polarizace a naopak působení vnějšího elektrického pole se projeví mimo jiné i deformací materiálu. Feroelektrické materiály tedy obecně vykazují vzájemnou závislost elektrických a mechanických veličin. Jejich vztah lze vyjádřit soustavou piezoelektrických stavových rovnic. Kromě uvedených piezoelektrických vlastností je možno u feroelektrik pozorovat i další zajímavé vlastnosti jako jsou pyroelektrické (změna polarizace s teplotou) nebo optoelektrické vlastnosti.

Cílem této práce byla formulace modelů pro simulaci elektrických a mechanických veličin ve vzorku feroelektrického materiálu vystaveném vnějšímu mechanickému a elektrickému působení založená na smíšené hybridní formulaci úlohy, aproximace úlohy metodou konečných prvků, počítačová implementace modelů a ověření jejich použitelnosti na základních úlohách.

Vzorek feroelektrického materiálu s vnitřní doménovou strukturou je z pohledu dielektrických, elastických a piezoelektrických vlastností anizotropním a heterogenním prostředím, jehož chování je popsáno soustavou parciálních diferenciálních rovnic. Zadávané okrajové podmínky konkrétní úlohy potom odrážejí

vnější působení. Modely jsou koncipovány tak, aby umožňovaly simulaci vzorků vystavených vnějšímu elektrickému poli nebo mechanickému namáhání a aby je bylo možné použít i pro simulaci elektromechanických polí ve vzorcích s nenulovou hustotou volného náboje v části objemu oblasti nebo na doménových stěnách.

Výsledné modely mohou sloužit jednak pro výpočet elektroelastického pole ve feroelektriku, popřípadě jako základ obecnějšího modelu chování vnitřní feroelektrické doménové struktury studovaného vzorku.

Vlastní text práce je logicky členěn do tří štěžejních částí. První část zahrnuje druhou kapitolu, která obsahuje souhrnný fyzikální popis modelovaných dějů. Je zde stručně uvedena problematika dielektrických, elastických a piezoelektrických vlastností. Tato kapitola rovněž uvádí základní fyzikální vlastnosti charakteristické právě pro feroelektrické látky.

Druhá část textu zahrnuje kapitoly zabývající se matematickou formulací a aproximací jednotlivých modelů. Třetí kapitola nejprve konkretizuje cíle práce, podává základní souhrn metod použitých pro formulaci modelů a zároveň stanovuje obecné požadavky kladené na modelované oblasti. Čtvrtá kapitola uvádí souhrnně prostory použité dále při formulaci a aproximaci modelů. V dalších třech kapitolách je uvedeno odvození matematické formulace modelů a jejich aproximace metodou konečných prvků. V páté kapitole je studován model elektrického pole v heterogenním anizotropním dielektrickém materiálu vystaveném vnějšímu elektrickému působení. V šesté kapitole je odvozen model elastického pole v heterogenním anizotropním elastickém materiálu vystaveném působení vnějších mechanických sil. V sedmé kapitole je uveden model elektroelastického pole ve feroelektrickém materiálu vystaveném vnějšímu elektrickému a mechanickému zatížení.

Třetí část textu obsahuje kapitoly osm a devět, které se zabývají praktickou stránkou předkládané práce. Osmá kapitola je věnována problematice počítačové implementace. Čtenáři je zde poskytnut základní přehled datových struktur modelu, obecný algoritmus výpočtu konkrétní úlohy, formáty vstupních a výstupních datových souborů a přehled významnějších algoritmů implementovaných při realizaci libovolného z navržených modelů. V deváté kapitole jsou uvedeny některé výsledky základních testovacích úloh. Jednotlivé úlohy zařazené v této kapitole jsou voleny s ohledem na ilustrativnost.

Část I

Fyzikální popis

Kapitola 2

Fyzikální vlastnosti feroelektrických látek

Tato práce je zaměřena na problematiku modelování feroelektrických látek – konkrétně na modelování rozložení elektrických a mechanických veličin ve feroelektrického vzorku vystaveném vnějšímu elektrickému a mechanickému působení. První kapitola je věnovaná fyzikálnímu popisu sledovaných jevů.

Feroelektrické látky patří do široké skupiny dielektrik. Tato kapitola nejprve stručně shrnuje obecné vlastnosti dielektrik a základní fyzikální vztahy pro formulaci navrhovaných modelů. Druhá část, je potom věnována popisu vlastností feroelektrických látek. Neklademe si za cíl podat vyčerpávající popis zahrnující všechny možné vlivy, ale pouze stručně shrnout podstatnou problematiku. Nejsou zde diskutovány vlastnosti a chování, které nejsou dále uvažovány při formulaci modelů (teplotní závislosti, nelineární závislosti, popis dynamiky dějů apod.). Jednotlivé fyzikální jevy jsou uvedeny pouze přehledově, pro hlubší popis problematiky odkazujeme čtenáře na [4], [13], [24], [25], [30], [31], popřípadě na další literaturu věnující se fyzice pevných a piezoelektrických látek.

2.1 Elektrická indukce a polarizace

Působením vnějšího elektrického pole na dielektrický materiál dochází k indukci elektrického náboje v daném materiálu. Závislost vektoru výsledné elektrické indukce na intenzitě elektrického pole je definována vztahem

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \mathbf{E} , \quad (2.1)$$

ve kterém \mathbf{D} označuje vektor elektrické indukce, \mathbf{E} vektor intenzity elektrického pole, ε_0 je permitivita vakua ($\varepsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} CV^{-1}m^{-1}$) a ε_r je relativní permitivita daného materiálu. V dalším textu bude převážně používána celková permitivita materiálu ε daná vztahem

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r .$$

Vektor intenzity elektrického pole \mathbf{E} je definován jako gradient skalárního elektrického potenciálu φ . Tedy

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi . \quad (2.2)$$

Vzorek dielektrika se jeví jako elektricky neutrální, pokud je zachováno rovnoměrné rozložení nábojů v objemu vzorku. Vložíme-li jej do elektrického pole dochází k posunutí nábojů, čímž se poruší vzájemná kompenzace kladných a záporných nábojů. Tento jev nazýváme o *polarizací dielektrika*. Polarizace se může uskutečnit několika způsoby:

- *Atomová polarizace* vzniká vzájemným posuvem kladně nabitého jádra a záporně nabitého elektronového obalu atomu.
- *Iontová polarizace* vzniká u látek, jejichž molekuly jsou složeny ze dvou nebo více iontů. O iontové polarizaci potom mluvíme dojde-li ke změně vzájemné polohy iontů v molekule.
- *Orientační polarizace* vzniká rovněž v látkách složených z iontových molekul, jsou-li tyto molekuly do té míry „volné“, že se mohou stáčet působením vnějšího pole.

Dielektrika, v kterých roste polarizace úměrně s rostoucí intenzitou pole, nazýváme *lineární dielektrika*. Hodnotu vektoru polarizace \mathbf{P} indukované vnějším elektrickým polem o intenzitě \mathbf{E} je pro tyto případy možno vyjádřit vztahem

$$\mathbf{P} = \mathbf{D} - \varepsilon_0\mathbf{E} = \varepsilon_0\varepsilon_r\mathbf{E} - \varepsilon_0\mathbf{E} = \varepsilon_0\kappa\mathbf{E} , \quad (2.3)$$

kde $\kappa = \varepsilon_r - 1$ je dielektrická susceptibilita.

V případě *izotropních materiálů* je relativní permitivita ε_r popř. dielektrická susceptibilita κ vyjádřena jediným koeficientem. Pro *anizotropní materiály* je nutné tyto materiálové parametry charakterizovat tenzorem druhého řádu. Vztahy (2.1)-(2.3) jsou v obecném případě tenzorovými rovnicemi a dielektrické vlastnosti materiálu jsou určeny složkami tenzoru permitivity ε se složkami ε_{ij} .

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} , \quad \varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji} , \quad \forall i, j \in \{1, 2, 3\} \quad (2.4)$$

Elektrostatické pole uvnitř dielektrického materiálu ve stacionárním stavu musí splňovat Maxwellovy rovnice. Pro námi sledované jevy mají tyto rovnice tvar

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \varrho \quad (2.5)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0 , \quad (2.6)$$

kde ϱ je hustota volného elektrického náboje ve sledovaném objemu.

Anisotropní prostředí

V neisotropním prostředí svírají vektory výsledné intenzity elektrického pole a elektrické indukce obecně různý úhel.

Heterogenní prostředí

V heterogenním prostředí, na rozhraní dvou prostředí s odlišnými dielektrickými koeficienty dochází k lomu elektrického pole, přičemž tečná složka intenzity elektrického pole a normálová složka elektrické indukce se nemění.

Ztrátový proud

Výše uvedené vztahy předpokládají, že příslušný dielektrický materiál je „ideálně nevodivý“. Tato podmínka nebývá ovšem zcela splněna. I dielektrika jsou mírně vodivá, a to i ve slabších polích, protože se v nich trvale udržuje jistý malý počet nabitých částic, které se v elektrickém poli mohou v látce pohybovat s určitou volností. Dochází tak k jevu nazývanému *ztrátový proud*. Jeho velikost je do značné míry ovlivněna případnými příměsemi v daném materiálu. K této mizivě malé vodivosti nebudeme při formulaci modelů přihlížet.

Depolarizační efekt

Vystavíme-li vzorek polarizovatelného materiálu působení vnějšího elektrického pole o intenzitě \mathbf{E}_{ext} , je indukováno vnitřní tzv. *depolarizační pole* \mathbf{E}_{int} . Intenzita výsledného elektrického pole je potom dána vztahem

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_{ext} + \mathbf{E}_{int} .$$

Depolarizační pole je závislé na tvaru příslušného vzorku. Tedy, jestliže dva vzorky stejného materiálu, různého tvaru vystavíme stejnému elektrickému působení potom \mathbf{E}_{int} a tedy i \mathbf{E} v rámci každého z těchto vzorků bude odlišné. Vzhledem k závislosti polarizace \mathbf{P} na intenzitě elektrického pole \mathbf{E} [viz rovnice (2.3)] budou oba vzorky vykazovat i odlišnou polarizaci. Rozdíly obou veličin jsou výrazné pro materiály s velkou relativní permitivitou ($\epsilon_r \gg 1$) a naopak prakticky nulové pro materiály s permitivitou blízké permitivitě vakua ϵ_0 . Praktickým důsledkem depolarizačního efektu je závislost výsledné polarizace sledovaného vzorku na jeho tvaru.

Elektrostatická energie

V elektrostatickém poli je uložena energie (práce vykonaná přemístěním náboje), která je rozložena v prostoru elektrostatického pole. *Hustota elektrické energie*, tedy energie připadající na objemovou jednotku elektrostatického pole je rovna

$$w_E = \frac{1}{2} \mathbf{E} \cdot \mathbf{D} . \quad (2.7)$$

Hustota elektrické energie je v obecném případě funkcí souřadnic, stálou hodnotu má pouze v homogenním poli. Energie nehomogenního pole je v oblasti Ω určena vztahem

$$W_E = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbf{E} \cdot \mathbf{D} d\Omega . \quad (2.8)$$

2.2 Napětí a deformace

Napětí v libovolném bodě vzorku pevného materiálu je vyjádřeno tenzorem druhého řádu

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{pmatrix}, \quad T_{ij} = T_{ji}, \quad \forall i, j \in \{1, 2, 3\} . \quad (2.9)$$

Tenzor napětí je symetrický. Symetrie tenzoru napětí je důsledkem rovnováhy momentů sil (viz například [24]). Složky T_{ii} nazýváme *normálovými napětími*, složky T_{ij} , $i \neq j$ *smýkovými (tečnými) napětími*.

Tenzor napětí v libovolném bodě sledovaného materiálu splňuje rovnice rovnice rovnováhy sil ve tvaru

$$\frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} + f_i = 0 , \quad (2.10)$$

kde f_i jsou složky vnitřní síly ve směru osy x_i . V případě, že v objemu sledovaného vzorku nepůsobí vnitřní síly, nebo jsou tyto vnitřní síly z hlediska působení povrchových sil zanedbatelné, lze zákon rovnováhy sil vyjádřit ve tvaru

$$\frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} = 0 . \quad (2.11)$$

Působením vnějších sil na vzorek materiálu dochází k jeho posunu, rotaci a deformaci. Zamezíme-li vhodným upevněním vzorku posunu a rotaci, je výsledkem působení vnějších sil pouze deformace materiálu. Uvažujme těleso Ω a bod $\mathbf{x} \in \Omega$. Po deformaci přejde těleso Ω na těleso Ω' a bod \mathbf{x} do bodu \mathbf{y}

$$\mathbf{y} = \mathbf{x} + \mathbf{u} , \quad (2.12)$$

kde \mathbf{u} je vektor posunutí. Na základě posunutí jsou definovány složky malé deformace vtažením

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.13)$$

Deformace materiálu je reprezentována symetrickým tenzorem druhého řádu

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} \end{pmatrix}, \quad S_{ij} = S_{ji}, \quad \forall i, j \in \{1, 2, 3\} . \quad (2.14)$$

Vzájemný vztah složek tenzoru deformace a napětí je dán Hookovým zákonem, který má pro obecný anizotropní materiál tvar

$$S_{ij} = s_{ijkl} T_{kl} , \quad (2.15)$$

popřípadě ho lze vyjádřit i v inverzním tvaru

$$T_{kl} = c_{ijkl} S_{ij} , \quad (2.16)$$

kde s_{ijkl} jsou složky tenzoru elastických koeficientů (charakterizují „poddajnost“ materiálu) a c_{ijkl} jsou složky tenzoru elastických modulů (charakterizují „tuhost“ materiálu). Jedná se o materiálové tenzory čtvrtého řádu. Tenzory elastických koeficientů a elastických modulů vykazují symetrii

$$\begin{aligned} s_{ijkl} &= s_{jikl} = s_{ijlk} = s_{jilk} , \\ c_{ijkl} &= c_{jikl} = c_{ijlk} = c_{jilk} , \quad \forall i, j, k, l \in \{1, 2, 3\} . \end{aligned} \quad (2.17)$$

Elastická energie

Při deformaci tělesa konají vnější síly práci proti vnitřním silám. Pokud napětí, jež v tělese při deformaci vznikají, nepřekročí mez pružnosti, budou se deformace při odlehčování zmenšovat a práci budou konat naopak vnitřní síly tím, že těleso postupně vracejí do původního tvaru. Mechanická energie se v deformovaném tělese mění v *energii elastickou*. *Hustota elastické energie* v každém bodě tělesa je vyjádřena rovnicí

$$w_M = \frac{1}{2} T_{ij} S_{ij} . \quad (2.18)$$

Elastická energie tělesa zaujímajícího objem Ω je určena vztahem

$$W_M = \frac{1}{2} \int_{\Omega} T_{ij} S_{ij} d\Omega . \quad (2.19)$$

2.3 Piezoelektrické vlastnosti

Působením tlaku na některá dielektrika dochází k polarizaci daného materiálu. Je-li hodnota výsledné polarizace přímoúměrná působícím silám, mluvíme o tzv. *přímém piezoelektrickém jevu*. Vzájemný vztah výsledné elektrické indukce a mechanického napětí je v případě piezoelektrického jevu vyjádřen rovnicí

$$D_i = d_{ijk} T_{jk} , \quad (2.20)$$

kde d_{ijk} , $i, j, k \in \{1, 2, 3\}$ jsou složky tenzoru piezoelektrických koeficientů.

Obdobně, vystavíme-li piezoelektrický materiál působení vnějšího elektrického pole dochází k deformaci materiálu. Tato vlastnost je známa jako *převrácený*

piezoelektrický jev. Vztah tenzoru deformace a vektoru intenzity elektrického pole je vyjádřen rovnicí

$$S_{ij} = d_{kij} E_k . \quad (2.21)$$

Materiálový tenzor piezoelektrických koeficientů d_{ijk} je tenzorem třetího řádu, vykazuje symetrii

$$d_{ijk} = d_{ikj}, \quad \forall i, j, k \in \{1, 2, 3\} . \quad (2.22)$$

Obsahuje maximálně 18 nezávislých složek.

2.4 Piezoelektrické stavové rovnice

Uvažujeme-li současně dielektrické, elastické i piezoelektrické vlastnosti lze vzájemné vztahy mezi tenzorem napětí, tenzorem deformace, vektorem elektrické indukce a vektorem intenzity elektrického pole popsat soustavou lineárních piezoelektrických stavových rovnic (viz. například [25], [31])

$$S_{ij} = s_{ijkl}^E T_{kl} + d_{nij} E_m \quad (2.23)$$

$$D_n = d_{nkl} T_{kl} + \varepsilon_{nm}^T E_m . \quad (2.24)$$

Popřípadě můžeme celou soustavu vyjádřit v některém z dalších tvarů:

$$T_{kl} = c_{ijkl}^E S_{ij} - e_{nkl} E_m \quad (2.25)$$

$$D_n = e_{nij} S_{ij} + \varepsilon_{nm}^S E_m \quad (2.26)$$

nebo

$$S_{ij} = s_{ijkl}^D T_{kl} + g_{mij} D_m \quad (2.27)$$

$$E_m = -g_{mkl} T_{kl} + \beta_{nm}^T D_m \quad (2.28)$$

nebo

$$T_{kl} = c_{ijkl}^D S_{ij} - h_{mkl} D_m \quad (2.29)$$

$$E_m = -h_{mij} S_{ij} + \beta_{nm}^S D_m \quad (2.30)$$

Souhrn fyzikálních veličin a materiálových tenzorů ze vztahů (2.23)-(2.30) včetně jejich rozměrů je uveden v tabulkách 2.1, 2.2.

Elastické koeficienty a moduly mohou být definovány pro konstantní elektrické pole s_{ijkl}^E, c_{ijkl}^E nebo pro konstantní elektrickou indukci s_{ijkl}^D, c_{ijkl}^D . Obdobně permitivita a impermeabilita mohou být definovány pro konstantní mechanické napětí $\varepsilon_{ij}^T, \beta_{ij}^T$ nebo pro konstantní deformaci $\varepsilon_{ij}^S, \beta_{ij}^S$. Dvojice (s_{ijkl}^E, c_{ijkl}^E) ,

Značení veličiny	Význam	Rozměr
T	tenzor mechanického napětí	Nm^{-2}
S	tenzor mechanické deformace	1
D	vektor elektrické indukce	Cm^{-1}
E	vektor intenzity elektrického pole	VmN^{-1}

Tabulka 2.1: Přehled fyzikálních veličin elektro-elastických stavových rovnic

Značení tenzoru	Význam	Jednotka
ε	tenzor elektrické permitivity	$CV^{-1}m^{-1}$
β	tenzor elektrické impermeability	VmC^{-1}
s	tenzor elastických koeficientů	mN^{-1}
c	tenzor elastických modulů	Nm^{-1}
d	tenzor piezoelektrických koeficientů	mV^{-1}
g	tenzor piezoelektrických koeficientů	m^2C^{-1}
h	tenzor piezoelektrických modulů	Vm^{-1}
e	tenzor piezoelektrických modulů	Cm^{-2}

Tabulka 2.2: Přehled materiálových tenzorů elektro-elastických stavových rovnic

(s_{ijkl}^D, c_{ijkl}^D) , $(\varepsilon_{ij}^S, \beta_{ij}^S)$, $(\varepsilon_{ij}^T, \beta_{ij}^T)$ jsou dvojice navzájem inverzních tenzorů. Další vztahy mezi jednotlivými materiálovými tenzory jsou vyjádřeny rovnicemi:

$$d_{mij} = g_{nij}\varepsilon_{nm}^T = e_{mkl}s_{ijkl}^E \quad (2.31)$$

$$g_{mkl} = d_{nkl}\beta_{nm}^T = h_{mij}s_{ijkl}^D \quad (2.32)$$

$$h_{mij} = e_{nij}\beta_{nm}^S = g_{mkl}c_{ijkl}^D \quad (2.33)$$

$$e_{mkl} = h_{nkl}\varepsilon_{nm}^S = d_{mij}c_{ijkl}^E \quad (2.34)$$

$$s_{ijkl}^D - s_{ijkl}^E = -g_{mkl}d_{mij} \quad (2.35)$$

$$c_{ijkl}^D - c_{ijkl}^E = e_{mij}h_{mkl} \quad (2.36)$$

$$\varepsilon_{nm}^S - \varepsilon_{nm}^T = -e_{mij}d_{nij} \quad (2.37)$$

$$\beta_{nm}^S - \beta_{nm}^T = g_{nij}h_{mij} \quad (2.38)$$

Výsledné elektro-elastické pole musí dále splňovat vztahy vyplývající ze zákona zachování energie, které byly uvedeny rovnicemi (2.5) a (2.10) resp. (2.11).

Mechanické i elektrické veličiny, jejichž vzájemný vztah byl uveden soustavou piezoelektrických stavových rovnic, vykazují obecně další významnou závislost a to závislost na teplotě. V uvedeném tvaru jsou piezoelektrické stavové rovnice použitelné pro výpočty za adiabatických popř. izotermních podmínek. V případě popisu dějů, které nesplňují předpoklady izotermie nebo adiabatčnosti, by bylo třeba uvedené stavové rovnice doplnit o teplotní závislosti (viz například [25],

[31]). Tyto případy ovšem nejsou při formulaci základních modelů uvažovány a proto se jimi nebudeme podrobněji zabývat.

Dalším významným předpokladem použití uvedených elektro-elastických stavových rovnic je linearita vztahů mezi jednotlivými veličinami. Obecně lze říci, že tyto rovnice vyhovují pro popis chování piezoelektrických látek v rozsahu malých mechanických deformací. V oblasti výraznějších deformací by potom bylo nutno uvažovat nelinearizované vztahy (viz například [31]).

2.5 Maticový tvar rovnic

Tenzory napětí a deformace jsou symetrické tenzory. Z celkových devíti složek každého z těchto tenzorů je maximálně šest nezávislých. S využitím této redukce se pro zpřehlednění zápisu velmi často používá zkráceného indexového označení, při kterém je tenzor napětí standardně vyjádřen ve formě vektoru délky o šesti složkách

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} \\ T_{22} \\ T_{33} \\ T_{32} \\ T_{31} \\ T_{21} \end{pmatrix}, \quad (2.39)$$

kde T_{ij} , $i, j \in \{1, 2, 3\}$ jsou složky tenzoru napětí a T_i , $i \in \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ jsou složky odpovídajícího vektoru.

Obdobně použijeme vektor \mathbf{s} pro uložení jednotlivých složek tenzoru deformace, který je standardně definován ve tvaru

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ S_4 \\ S_5 \\ S_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} \\ S_{22} \\ S_{33} \\ 2S_{32} \\ 2S_{31} \\ 2S_{21} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \\ \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \\ \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \\ \frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \\ \frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \\ \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \end{pmatrix}. \quad (2.40)$$

Tenzory elastických koeficientů a elastických modulů obsahují maximálně 36 nezávislých složek a lze je reprezentovat maticí velikosti 6×6 . Například tenzor

elastických koeficientů v maticovém vyjádření lze standardně vyjádřit ve tvaru

$$\begin{aligned} \mathbf{s} &= \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & s_{14} & s_{15} & s_{16} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} & s_{24} & s_{25} & s_{26} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} & s_{34} & s_{35} & s_{36} \\ s_{41} & s_{42} & s_{43} & s_{44} & s_{45} & s_{46} \\ s_{51} & s_{52} & s_{53} & s_{54} & s_{55} & s_{56} \\ s_{61} & s_{62} & s_{63} & s_{64} & s_{65} & s_{66} \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} s_{1111} & s_{1122} & s_{1133} & 2s_{1132} & 2s_{1131} & 2s_{1121} \\ s_{2211} & s_{2222} & s_{2233} & 2s_{2232} & 2s_{2231} & 2s_{2221} \\ s_{3311} & s_{3322} & s_{3333} & 2s_{3332} & 2s_{3331} & 2s_{3321} \\ 2s_{3211} & 2s_{3222} & 2s_{3233} & 4s_{3232} & 4s_{3231} & 4s_{3221} \\ 2s_{3111} & 2s_{3122} & 2s_{3133} & 4s_{3132} & 4s_{3131} & 4s_{3121} \\ 2s_{2111} & 2s_{2122} & 2s_{2133} & 4s_{2132} & 4s_{2131} & 4s_{2121} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.41)$$

$$\text{kde } s_{ijkl} = s_{jikl} = s_{ijlk} = s_{jilk}.$$

Zcela obdobný je maticový tvar tenzoru elastických modulů. Takto zavedená matice je opět symetrická.

Tenzory piezoelektrických koeficientů mají maximálně 18 nezávislých složek a jsou vyjadřovány pomocí matice velikosti 3×6 standardně zaváděné ve tvaru

$$\begin{aligned} \mathbf{d} &= \begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & d_{14} & d_{15} & d_{16} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & d_{24} & d_{25} & d_{26} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & d_{34} & d_{35} & d_{36} \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} d_{111} & d_{122} & d_{133} & 2d_{132} & 2d_{131} & 2d_{121} \\ d_{211} & d_{222} & d_{233} & 2d_{232} & 2d_{231} & 2d_{221} \\ d_{311} & d_{322} & d_{333} & 2d_{332} & 2d_{331} & 2d_{321} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.42)$$

$$\text{kde } d_{ikl} = d_{ilk}.$$

Obdobně jsou standardně zaváděny maticové tvary tenzoru piezoelektrických koeficientů \mathbf{g} a tenzorů piezoelektrických modulů \mathbf{h} , \mathbf{e} .

Elektro-elastické stavové rovnice (2.23), (2.24) lze při použití zkráceného indexového značení zapsat v jednodušším maticovém tvaru

$$S_i = s_{ij}^E T_j + d_{ki} E_k, \quad (2.43)$$

$$D_l = d_{lj} T_j + \varepsilon_{kl}^T E_k. \quad (2.44)$$

Poznámka 2.1: V důsledku symetrie krystalové struktury konkrétního materiálu dochází potom k další redukci počtu nezávislých složek v jednotlivých materiálových tenzorech.

Poznámka 2.2: Při formulaci modelů a jejich aproximaci budou využity jak tenzorový tak maticový tvar rovnic. Tenzorový tvar je výhodnější pro matematickou formulaci modelů. Maticový tvar je potom praktičtější při implementaci.

2.6 Transformace materiálových tenzorů

Číselné hodnoty jednotlivých složek materiálových tenzorů piezoelektrických stavových rovnic bývají vztaženy k základnímu souřadnému systému. Naproti tomu pro výpočet konkrétních vzorků je třeba uvažovat obecnou orientaci v prostoru. Pro výpočet materiálových tenzorů pro tyto případy užijeme transformační rovnice.

Uvažujeme transformační matici \mathbf{A} ve 3D tvaru:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}, \quad (2.45)$$

Na tenzory druhého řádu (tenzory permitivity a permeability) aplikujeme transformaci

$$\varepsilon'_{ij} = a_{ik}a_{jl}\varepsilon_{kl}, \quad (2.46)$$

na tenzory třetího řádu (tenzory piezoelektrických koeficientů) potom

$$d'_{ijk} = a_{il}a_{jm}a_{kn}d_{lmn}, \quad (2.47)$$

a na tenzory čtvrtého řádu (tenzory elastických koeficientů a elastických modulů) aplikujeme transformaci ve tvaru

$$s'_{ijkl} = a_{ip}a_{jq}a_{kr}a_{ls}s_{pqrs}. \quad (2.48)$$

Poznámka 2.3: Tenzory druhého, třetího popř. čtvrtého řádu jsou definovány právě jako struktury, které při transformaci vyhovují vztahům (2.46), (2.47) popř. (2.48), (viz například [24]).

Poznámka 2.4: Transformace nelze přímo aplikovat na materiálové tenzory třetího a čtvrtého řádu (tenzory elastických koeficientů a modulů, tenzory piezoelektrických koeficientů a modulů) vyjádřené v redukovaném maticovém tvaru. V takovémto případě je nutno přejít na tenzorový tvar, provést transformaci a výsledný tenzor konvertovat opět do maticového tvaru.

Poznámka 2.5: Formulace modelů v následující části práce se omezuje na dvou-dimenzionální restrikcí obecně třídimenzionální úlohy. Pro konkrétní případ rotace o úhel θ ve 2D je používána transformační matice

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (2.49)$$

2.7 Vztah struktury krystalů a materiálových tenzorů

V předcházejících kapitolách byly stručně připomenuty základní vlastnosti dielektrických látek a vzájemné vztahy mezi elektrickými a mechanickými veličinami. Specifické vlastnosti té které konkrétní látky jsou podmíněny její vlastní vnitřní krystalickou strukturou (viz například [25], [31]).

Základním znakem krystalů je zákonité uspořádání krystalů do *krystalové strukturní mříže*. Krystalovou strukturní mříž lze vytvořit posouváním vhodného rovnoběžnostěnu ve směru jeho hran. Nejjednodušší takovýto rovnoběžnostěn nazýváme *elementární krystalovou buňkou*. Souřadnicový systém os rovnoběžných s hranami elementární buňky nazýváme *krystalografickými osami*. Různé způsoby uspořádání krystalové mříže se obvykle charakterizují pomocí pravotočivého souřadného systému krystalografických os. Na základě sedmi různých systému os je definováno sedm základních krystalografických soustav:

- krychlová (kubická)
- čtverečná (tetragonální)
- šesterečná (hexagonální)
- trigonální
- kosočtverečná (rombická)
- jednoklonná (monoklinická)
- trojklonná (triklinická)

Jednotlivé krystalografické soustavy se vyznačují konkrétní velikostí úhlů mezi krystalografickými osami a poměrem délek hran elementární buňky a zároveň jsou pro ně charakteristické i příslušné prvky souměrnosti. Na základě prvků souměrnosti se krystaly dělí do 32 krystalových grup souměrnosti (podrobnější popis lze nalézt například v [30], [31]).

Se souměrností krystalové mříže souvisí i případný anizotropní charakter fyzikálních vlastností jednotlivých látek. V souladu s *Neumanovým principem* [25] se tenzory materiálových vlastností vyznačují stejnou popř. vyšší symetrií, než odpovídá souměrnosti krystalu. Například výše uvedené piezoelektrické vlastnosti je možno očekávat pouze u takových látek které nemají střed souměrnosti základní krystalické buňky (20 grup symetrie z celkových 32). Jednotlivé tenzory materiálových vlastností (elastické, piezoelektrické, dielektrické) mají pro různé látky v rámci jediné grupy symetrie svoji jednoznačnou charakteristickou strukturu Pro konkrétnější a podrobnější informace odkazujeme čtenáře například na [25] a [31].

2.8 Vlastnosti feroelektrických látek

2.8.1 Piezoelektrický, pyroelektrický a feroelektrický jev

Piezoelektrické látky (piezoelektrika) jsou látky, které vykazují lineární závislost mezi působícím vnějším napětím a polarizací materiálu indukovanou vnějším působením. Piezoelektrika patří do širší skupiny dielektrik.

Pyroelektrické látky (pyroelektrika) jsou látky, které vykazují závislost polarizace na teplotě - jsou to látky, které jsou v jistém teplotním rozsahu spontánně polarizovány.

Feroelektrické látky (feroelektrika) jsou látky, které mají jistou *spontánní polarizaci* (tj. polarizaci bez působení vnějšího elektrického pole), která může být změněna vnějším zatížením tj. vnějším elektrickým polem popř. vnějším mechanickým namáháním. Feroelektrika patří do širší skupiny piezoelektrik a pyroelektrik.

Při ohřátí feroelektrického materiálu nad jistou teplotu tzv. *Curieovu teplotu* T_C dochází díky pyroelektrickým vlastnostem k vymizení spontánní polarizace. Při teplotě nižší než T_C je látka ve své *feroelektrické fázi*. Při teplotě vyšší než T_C je látka v tzv. *paraelektrické fázi*. Teplota T_C je nazývána rovněž teplotou fázového přechodu.

Kromě spontánní polarizace, s ní související spontánní deformace a Curieovy teploty je další významnou charakteristikou feroelektrik tzv. *koercitivní pole* - tj. minimální intenzita elektrického pole nutná pro přepólování - popř. intenzita elektrického pole potřebná pro vynulování celkové polarizace materiálu.

2.8.2 Doménová struktura feroelektrických látek

Jak již bylo uvedeno, feroelektrické materiály vykazují jistou spontánní polarizaci, kterou je možno změnit vnějším elektrickým polem. Ve feroelektrickém materiálu tedy musí nutně existovat minimálně dva různé základní směry spontánní polarizace. Orientaci možných směrů vztahujeme obecně k základní orientaci krystalové mřížky.

Feroelektrické krystaly

Jedná se o monokrystalické látky. Každý feroelektrický materiál má několik základních směrů spontánní polarizace. Oblast materiálu s jednotnou orientací spontánní polarizace se nazývá *doména*. Hranice mezi dvěma doménami je nazývána *doménová stěna*.

Jako příklad může být uveden materiál s tetragonální krystalovou strukturou, který má šest základních směrů spontánní polarizace podél jednotlivých os základního souřadného systému. Tyto směry označme X , $-X$, Y , $-Y$, Z , $-Z$. Úhel mezi dvěma různými směry spontánní polarizace může být v tomto případě 180° nebo 90° (hodnota 90° není zcela přesná, ve skutečnosti je tento úhel roven $89,7^\circ$). V monokrystalických materiálech s tetragonální krystalovou strukturou

můžeme tedy pozorovat 180° nebo 90° doménové stěny. Obdobně bychom mohli rozebrat případnou doménovou strukturu i pro feroelektrické materiály s dalšími krystalickými strukturami.

Vlivem vnějšího elektrického nebo mechanického působení může docházet ke změně spontánní polarizace a tím i ke změně vnitřní doménové struktury takovýchto materiálů.

Piezoelektrické keramiky

O keramikách mluvíme v souvislosti s polykrystalickými materiály. Piezoelektrická keramika se skládá z monokrystalických zrn. Zmíněná doménová struktura může být vytvořena v rámci jednotlivých zrn. Hranice mezi zrny, na rozdíl od doménových stěn, představují neměnné hranice. Vzájemná orientace spontánní polarizace mezi jednotlivými zrny může být zcela libovolná. Vzhledem k libovolné orientaci jednotlivých zrn keramiky tyto materiály v makroskopickém měřítku bez *pólování* nevykazují žádnou spontánní polarizaci. Při pólování je materiál vytaven působením vnějšího elektrického pole, jehož intenzita přesahuje hodnotu koercitivního pole.

2.8.3 Fyzikální popis feroelektrik

Vzhledem k uvedeným základním vlastnostem feroelektrických látek lze pro popis jejich chování v případě neměnné doménové struktury použít piezoelektrické stavové rovnice. Hodnoty jednotlivých fyzikálních veličin (elektrické indukce, deformace) vypočtených v souladu s těmito rovnicemi odpovídají dějům indukovaným vlivem vnějšího působení (vnější příspěvky). Vzhledem ke spontánní polarizaci \mathbf{P}^0 a s ní související spontánní deformaci \mathbf{S}^0 (vnitřní příspěvky) jsou celková elektrická indukce \mathbf{D}^{celk} a celková deformace \mathbf{S}^{celk} ve sledovaném vzorku rovny

$$\begin{aligned} S_{ij}^{celk} &= S_{ij} + S_{ij}^0, \\ D_n^{celk} &= D_n + P_n^0. \end{aligned}$$

Spontánní polarizace případně spontánní deformace těchto látek se ve výše uvedených stavových rovnicích projeví jako aditivní členy k příslušným veličinám. Piezoelektrické stavové rovnice je potom možno zapsat ve tvaru

$$S_{ij}^{celk} - S_{ij}^0 = s_{ijkl}^E T_{kl} + d_{nij} E_m, \quad (2.50)$$

$$D_n^{celk} - P_n^0 = d_{nkl} T_{kl} + \varepsilon_{nm}^T E_m. \quad (2.51)$$

Vlivem vnitřních příspěvků je závislost celkové polarizace materiálu (popřípadě celkové deformace) na vnějším působení (elektrickém, mechanickém) u feroelektrických materiálů nelineární - vykazuje *hysterezi*.

Část II

Formulace a aproximace navržených modelů

Kapitola 3

Cíle a metody práce

Tato kapitola poskytuje přehled základních cílů předkládané práce, uvádí obecnou charakteristiku použité metody a popis modelované oblasti.

3.1 Základní cíle

Feroelektrické látky vykazují jisté dielektrické, elastické a piezoelektrické vlastnosti. Z hlediska těchto vlastností se jedná o anizotropní prostředí. Navíc případné doménové stěny znamenají výraznou heterogenitu (skokovou změnu) materiálových vlastností.

Základním cílem této disertační práce je matematická formulace a implementace modelů, které by umožňovaly simulovat rozložení elektrických a mechanických veličin v tenké vrstvě feroelektrického materiálu (s libovolnou vnitřní strukturou feroelektrických domén) vystavené vnějšímu elektrickému a mechanickému zatížení. Na základě bližší specifikace úlohy, i s ohledem na obecnější aplikovatelnost, byly pro formulaci a implementaci modelů vymezeny tři základní úlohy:

1. úloha: *výpočet rozložení elektrických veličin* (elektrický potenciál, elektrická indukce a intenzita elektrického pole) v heterogenním anizotropním dielektrickém materiálu vystaveném působení vnějšího elektrického pole.
2. úloha: *výpočet rozložení mechanických veličin* (mechanické posunutí, mechanické napětí a mechanická deformace) v heterogenním anizotropním elastickém materiálu vystaveném zatížení vnějších mechanických sil.
3. úloha: *výpočet rozložení elektroelastického pole* (elektrické i mechanické veličiny) ve feroelektrickém materiálu vystaveném vnějšímu elektrickému a mechanickému zatížení.

Fyzikální popis chování feroelektrických (případně pouze dielektrických nebo elastických) látek vede při formulaci libovolné ze stanovených úloh v soustavu

parciálních diferenciálních rovnic (PDR) doplněných o zadání okrajových podmínek konkrétní úlohy. Analytické řešení obdobných problémů je možné pouze v případě přijetí velmi zjednodušujících geometrických podmínek. Numerická matematika poskytuje pro řešení problémů popsaných parciálními diferenciálními rovnicemi několik metod (metoda konečných diferencí MKD, metoda konečných prvků MKP, metoda konečných objemů MKO), které poskytují různé možnosti řešení a mají různé vlastnosti v závislosti na daném problému. Pro řešení výše uvedených úloh byla zvolena metoda konečných prvků (MKP) aplikovaná na smíšenou hybridní formulaci úlohy (MH MKP).

3.2 Použitá matematická formulace úlohy

Matematická formulace výše definovaných úloh vychází z rovnic postupně uvedených v kapitole 2 doplněných o zadání okrajových podmínek na hranici modelované oblasti. V našem případě budou uvažovány dva typy okrajových podmínek – Dirichletova a Neumanova. *Dirichletova okrajová podmínka* předepisuje zadání potenciálu pro elektrickou část úlohy resp. zadání definovaných posunutí pro elastickou část. *Neumanova okrajová podmínka* zadává velikost vektoru elektrické indukce ve směru vnější normály pro elektrickou část a mechanické zatížení pro elastickou část úlohy.

V obecném případě je možné uvažovat též *Newtonovu okrajovou podmínku*, která zavádí vztah závislosti mezi vektorem elektrické indukce a spádem potenciálu pro elektrickou část úlohy resp. vztahy závislosti posunutí na silovém zatížení pro mechanickou část. Tato podmínka je nejobecnější, avšak formuálně i implementačně složitější. V námi uvažovaných reálných aplikacích (studium elektromechanických polí ve feroelektrických vzorcích) není nutné tuto obecnou okrajovou podmínku uplatňovat.

Standardním způsobem přístupu k matematické formulaci uvažovaných úloh je dosazení vztahu pro elektrickou indukci do Maxwellovy rovnice pro uvažovaný materiál v případě elektrické části úlohy resp. dosazení Hookova zákona s využitím definičního vztahu pro tenzor malých deformací do rovnice rovnováhy sil. Tímto krokem eliminujeme ze soustavy parciálních diferenciálních rovnic vektor elektrické indukce resp. tenzor napětí a získáme parciální diferenciální rovnice v takzvaném divergentním tvaru. Formulace slabého řešení vede na nalezení funkce definující elektrický potenciál v elektrické části resp. vektorové funkce pro posunutí v mechanické části. Obvykle se v těchto případech pro aproximaci úloh využívají lineární konečné prvky. Pro výpočet vektoru elektrické indukce a tenzoru mechanického napětí tak dostáváme funkce po částech (elementech) konstantní. Tedy pro tento postup nemohou být splněny rovnice spojitosti vektoru elektrické indukce a rovnováhy sil na mezelementových stěnách.

Vzhledem k tomu, že jedním z hlavních cílů této práce je vytvoření softwarové podpory pro studium elektrických a mechanických polí na rozhraní dvou feroelektrických domén, chceme ve formulaci zajistit splnění podmínek spoji-

tosti pro vektor elektrické indukce a tenzor mechanického napětí. Proto byla pro matematickou fomulaci výše uvedených úloh zvolena smíšená metoda. Ta požaduje slabé splnění vztahu pro vektor elektrické indukce, Maxwellovy rovnice pro dielektrický materiál, Hookova zákona s využitím vtahu pro tenzor malých deformací a rovnice rovnováhy sil. Tato formulace nám ve svém výsledku poskytne funkci pro potenciál, funkci pro vektor elektrické indukce, funkci pro vektor posunutí a tenzorovou funkci pro mechanické napětí. Tyto výsledky dosáhneme za cenu složitější formulace. Při konkrétní aproximaci může v tomto případě být problematické hledání konečnědimenzionálních podprostorů prostorů funkcí vystupujících ve formulaci úlohy. Komplikace vznikají především při tvorbě báze prostorů vektorových a tenzorových funkcí svázaných s konkrétním rozkladem oblasti. Přesto tato metoda představuje nové pojetí řešení takovýchto úloh. Výše zmíněná komplikace je obvykle řešena hybridizací úlohy, při které jsou vektorové a tenzorové funkce definovány pouze na jednotlivých elementech a formulace je doplněna o vazby vzájemné interakce vektorových a tenzorových veličin na mezelementových stěnách. I když celý postup je velmi komplikovaný, výsledná stavová struktura (matice) je topologicky velmi přehledná, což lze považovat za přednost této formulace. Navíc tato formulace umožňuje zadávat velikost náboje na mezelementových stěnách kompatibilních s případnou doménovou stěnou a právě generování elektrického náboje na části resp. celé doménové stěně je jedním z fyzikálních jevů, které má vytvořený model postihovat.

3.3 Modelovaná oblast a její rozklad

Oblast Ω

Protože aplikace formulovaných modelů je zaměřena na studium tenkých vrstev, omezíme se na dvourozměrnou restrikcí obecně třidimenzionální úlohy. V našem případě je tedy modelovaná oblast $\Omega \subset E_2$, kde E_2 je dvourozměrný euklidovský prostor.

Hranice oblasti $\partial\Omega$

Hranici oblasti označíme $\partial\Omega$. Předpokládáme, že je *lipschitzovská*. Přesná definice tohoto pojmu je poměrně složitá, a proto zde není uvedena, lze ji nalézt například v [24] nebo [28]. Na hranici oblasti jsou definovány okrajové podmínky dvou typů - Dirichletova a Neumanova. *Dirichletova okrajová podmínka* předepisuje hodnotu elektrického potenciálu resp. hodnotu vektoru posunutí na dané části hranice. *Neumanova okrajová podmínka* předepisuje hodnotu toku elektrické indukce popřípadě silové zatížení. Symbolem $\bar{\Omega}$ označíme oblast včetně její hranice, tedy $\bar{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega$.

Rozklad oblasti τ_h

Oblast Ω rozdělíme na konečný počet navzájem disjunktních podoblastí tak, aby zvolený rozklad byl kompatibilní se zadáním okrajových podmínek. Rozklad oblasti označíme symbolem τ_h , kde parametr h nazýváme diskretizačním parametrem. Jednotlivé podoblasti označíme symbolem e , hranici jediné podoblasti symbolem ∂e a podoblast včetně její hranice \bar{e} . Dále označíme Γ_D jako množinu všech vnějších stěn rozkladu, na kterých je zadána Dirichletova okrajová podmínka, Γ_N jako množinu všech vnějších stěn rozkladu, na kterých je zadána Neumanova okrajová podmínka, a Γ_h jako množinu všech *nedirichletovských stěn* rozkladu (jedná se tedy o množinu všech vnitřních stěn a vnějších stěn, na kterých je zadána Neumanova okrajová podmínka). Tedy rozklad oblasti splňuje následující podmínky

$$\begin{aligned} e_i \cap e_j &= \emptyset \quad \text{pro } i \neq j, \\ \bar{\Omega} &= \cup_{e \in \tau_h} \bar{e}, \\ \Gamma_h &= \cup_{e \in \tau_h} \partial e - \Gamma_D \end{aligned}$$

Poznámka 3.1: U jednotlivých formulací budou potom dalším indexem rozlišeny množiny Γ_D , Γ_N , Γ_h pro elektrickou a elastickou část.

Pro odvození aproximace metodou konečných prvků dále předpokládáme, že rozklad τ_h splňuje dodatečné požadavky:

- Pro rozklad oblasti Ω jsou použity trojúhelníky – jako podoblasti.
- Je splněna podmínka kompatibility podoblastí – tj. sousední podoblasti se dotýkají vždy celou stěnou.
- Rozklad je kompatibilní se zadáním Dirichletovy a Neumanovy okrajové podmínky. Tedy část hranice, na níž je zadána Dirichletova okrajová podmínka musí být sjednocením některých stěn rozkladu. Obdobně i pro část hranice, na níž je zadána Neumanova okrajová podmínka.
- Rozklad je kompatibilní s doménovou strukturou modelované oblasti.
- Rozklad oblasti je regulární. Tedy podíl nejmenší a nejdelší stěny rozkladu zůstává větší než dané kladné číslo a to i při dalším zjemňování rozkladu.

Posledně uvedená podmínka je důležitá ke studiu konvergenčních vlastností řešení aplikované numerické metody. Dodržení parametru regularity ovlivňuje podmíněnost výsledné stavové soustavy a tím i rychlost konvergence algebraických metod užitých pro její řešení.

Poznámka 3.2: Z terminologického hlediska budeme používat rovněž pojem *síť* jako synonymu pro rozklad a pojem *element* jako synonymum pro podoblast.

Kapitola 4

Prostory funkcí

V této kapitole budou postupně zavedeny funkční prostory použité při odvození slabé formulace a při aproximaci modelů. Zavedené prostory budou potom postupně používány v následujících kapitolách 5, 6, 7.

Zavedení značení

V dalším textu budou pro zkrácení a zpřehlednění zápisu odlišeny integrální formy počítané na ploše a na křivce tvarem použitých závorek následujícím způsobem

$$\begin{aligned}(f, g)_\Omega &= \int_\Omega f(x)g(x)dx, \\ \langle f, g \rangle_\Gamma &= \int_\Gamma f(x)g(x)dl,\end{aligned}$$

kde Ω je oblast v E_2 , Γ je křivka v E_2 a $x = (x_1, x_2)$ je bod v E_2 .

4.1 Prostory integrovatelných funkcí

Prostor $L^2(\Omega)$

$L^2(\Omega)$ je prostor všech funkcí definovaných na oblasti Ω , které jsou integrovatelné s kvadrátem (integrovatelnost v Lebesgueově smyslu, viz [28]).

$$L^2(\Omega) = \{\varphi : \Omega \rightarrow R; \int_\Omega \varphi^2 dx < \infty\} \quad (4.1)$$

Pro dvě funkce $\varphi_1, \varphi_2 \in L^2(\Omega)$ je definován skalární součin

$$(\varphi_1, \varphi_2)_\Omega = \int_\Omega \varphi_1 \varphi_2 dx. \quad (4.2)$$

Na základě skalárního součinu je definována indukovaná norma

$$\|\varphi\|_\Omega = \left(\int_\Omega \varphi^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (4.3)$$

Podrobnější rozbor vlastností tohoto prostoru včetně vlastností skalárního součinu a normy lze vyhledat například v [20], [28].

Prostor $\mathbf{L}^2(\Omega)$

Prostor funkcí $\mathbf{L}^2(\Omega)$ je definován jako prostor vektorových funkcí, jejichž složky jsou integrovatelné s kvadrátem, tedy

$$\mathbf{L}^2(\Omega) = L^2(\Omega) \times L^2(\Omega) \quad (4.4)$$

a skalární součin pro $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2 \in \mathbf{L}^2(\Omega)$

$$(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)_\Omega = \int_\Omega \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_2 \, dx . \quad (4.5)$$

Prostor $H^1(\Omega)$

Symbolem $H^1(\Omega)$ označíme množinu těch funkcí z $L^2(\Omega)$, jejichž gradient je prvkem prostoru $\mathbf{L}^2(\Omega)$, tedy

$$H^1(\Omega) = \{\varphi \in L^2(\Omega); \nabla \varphi \in \mathbf{L}^2(\Omega)\} . \quad (4.6)$$

Pro dvě funkce $\varphi_1, \varphi_2 \in H^1(\Omega)$ definujeme skalární součin

$$(\varphi_1, \varphi_2)_{1,\Omega} = \int_\Omega (\varphi_1 \cdot \varphi_2 + \nabla \varphi_1 \cdot \nabla \varphi_2) \, dx . \quad (4.7)$$

Prostor $\mathbf{H}(\text{div}, e)$

Na podoblasti e definujeme $\mathbf{H}(\text{div}, e)$ jako množinu všech vektorových funkcí z $\mathbf{L}^2(e)$, jejichž divergence na podoblasti e existuje a patří do prostoru $L^2(e)$.

$$\mathbf{H}(\text{div}, e) = \{\mathbf{v} \in \mathbf{L}^2(e); \nabla \cdot \mathbf{v} \in L^2(e)\} \quad (4.8)$$

Pro funkce $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2 \in \mathbf{H}(\text{div}, e)$ lze zavést skalární součin

$$(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)_{\text{div}, e} = \int_e [\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_2 + (\nabla \cdot \mathbf{v}_1)(\nabla \cdot \mathbf{v}_2)] \, dx . \quad (4.9)$$

Prostor $\mathbf{H}(\text{div}, \tau_h)$

Množinu vektorových funkcí z $\mathbf{L}^2(\Omega)$, které jsou na všech podoblastech e rozkladu τ_h prvkem příslušného prostoru $\mathbf{H}(\text{div}, e)$ označíme $\mathbf{H}(\text{div}, \tau_h)$. Označíme-li symbolem \mathbf{v}^e restrikcí funkce \mathbf{v} na podoblast e , potom

$$\mathbf{H}(\text{div}, \tau_h) = \{\mathbf{v} \in \mathbf{L}^2(\Omega); \mathbf{v}^e \in \mathbf{H}(\text{div}, e), \forall e \in \tau_h\} . \quad (4.10)$$

Pro funkce $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2 \in \mathbf{H}(\text{div}, \tau_h)$ lze zavést skalární součin

$$(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)_{\text{div}, \Omega} = \int_\Omega [\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_2 + (\nabla \cdot \mathbf{v}_1)(\nabla \cdot \mathbf{v}_2)] \, dx. \quad (4.11)$$

Prostor $\mathbf{W}(div, e)$

Symbolem $\mathbf{W}(div, e)$ označíme množinu všech symetrických tenzorových funkcí druhého řádu na podoblasti e jejichž divergence existuje a patří do prostoru $\mathbf{L}^2(e)$.

$$\mathbf{W}(div, e) = \{\mathbf{w}; [w_{ij} = w_{ji}] \& [\nabla \cdot \mathbf{w} \in \mathbf{L}^2(e)], i, j = 1, 2\} , \quad (4.12)$$

kde divergence tenzorové funkce $\nabla \cdot \mathbf{w} = (\frac{\partial w_{1j}}{\partial x_j}, \frac{\partial w_{2j}}{\partial x_j})$.

Pro funkce $\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2 \in \mathbf{W}(div, e)$ lze zavést skalární součin

$$(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2)_{div, e} = \int_e [\mathbf{w}_1 : \mathbf{w}_2 + (\nabla \cdot \mathbf{w}_1) \cdot (\nabla \cdot \mathbf{w}_2)] dx , \quad (4.13)$$

kde $\mathbf{w}_1 : \mathbf{w}_2$ značí skalární součin tenzorů $\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2$.

Prostor $\mathbf{W}(div, \tau_h)$

Symbolem $\mathbf{W}(div, \tau_h)$ označíme množinu všech symetrických tenzorových funkcí druhého řádu na rozkladu τ_h , které jsou na každé podoblasti e prvkem příslušného prostoru $\mathbf{W}(div, e)$.

$$\mathbf{W}(div, \tau_h) = \{\mathbf{w}; \mathbf{w}^e \in \mathbf{W}(div, e), \forall e \in \tau_h\} \quad (4.14)$$

Pro funkce $\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2 \in \mathbf{W}(div, \tau_h)$ zavádíme skalární součin

$$(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2)_{div, \Omega} = \int_{\omega} [\mathbf{w}_1 : \mathbf{w}_2 + (\nabla \cdot \mathbf{w}_1) \cdot (\nabla \cdot \mathbf{w}_2)] dx. \quad (4.15)$$

Prostor $H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h)$

Na struktuře stěn Γ_h definujeme prostor $H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h)$ jako množinu reálných funkcí, které jsou stopou některé funkce z prostoru $H^1(\Omega)$ (definice stopy funkce viz například v [28]).

$$H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h) = \{\mu : \Gamma_h \rightarrow R; \exists \varphi \in H^1(\Omega), \mu = \gamma_h \varphi\} , \quad (4.16)$$

kde γ_h je operátor stop na Γ_h . Pro funkce $\mu \in H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h)$ a $\mathbf{v} \in \mathbf{H}(div, \tau_h)$ zavádíme integrální formu

$$\langle \mu, \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \rangle_{\Gamma_h} = \int_{\Gamma_h} \mu \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dl . \quad (4.17)$$

Prostor $\mathbf{H}^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h)$

Prostor $\mathbf{H}^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h)$ tvoří takové vektorové funkce definované na struktuře stěn Γ_h , jejichž složky jsou prvky prostoru $H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h)$.

$$\mathbf{H}^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h) = H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h) \times H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h) \quad (4.18)$$

Pro funkce $\nu \in \mathbf{H}^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h)$ a $\mathbf{w} \in \mathbf{W}(\text{div}, \tau_h)$ zavádíme integrální formu

$$\langle \nu, \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} \rangle_{\Gamma_h} = \int_{\Gamma_h} \nu \cdot (\mathbf{w} \cdot \mathbf{n}) \, dl. \quad (4.19)$$

4.2 Aproximační prostory

Symbolem $P_k(\Omega)$ označíme množinu všech polynomů nejvýše k -tého stupně definovaných na oblasti Ω . V rámci aproximačního kroku budou použity následující funkční prostory.

Prostor $M_h(\tau_h)$

Prostor funkcí $M_h(\tau_h)$ je definován jako prostor všech na podoblastech konstantních funkcí.

$$M_h(\tau_h) = \{\varphi; \varphi^e \in [L^2(e) \cap P_0(e)]\} \quad (4.20)$$

Funkce prostoru $M_h(\tau_h)$ použijeme pro aproximaci elektrického potenciálu na jednotlivých elementech rozkladu.

Prostor $\mathbf{M}_h(\tau_h)$

Prostor funkcí $\mathbf{M}_h(\Omega)$ je definován jako prostor vektorových funkcí, jejichž složky patří do prostoru $M_h(\tau_h)$.

$$\mathbf{M}_h(\tau_h) = M_h(\tau_h) \times M_h(\tau_h) \quad (4.21)$$

Funkce prostoru $\mathbf{M}_h(\tau_h)$ použijeme pro aproximaci mechanického posunutí na jednotlivých elementech.

Prostor $H_h^1(\tau_h)$

Symbolem $H_h^1(\tau_h)$ označíme množinu těch funkcí z $L^2(\Omega)$, jejichž gradient je prvkem prostoru $M_h(\tau_h)$.

$$H_h^1(\tau_h) = \{\varphi; \nabla \varphi \in \mathbf{M}_h(\tau_h)\}. \quad (4.22)$$

Prostor $\mathbf{H}_h(\text{div}, \tau_h)$

Množinu vektorových funkcí z prostoru $\mathbf{H}(\text{div}, \tau_h)$, jejichž složky jsou polynomy prvního stupně označíme $\mathbf{H}_h(\text{div}, \tau_h)$.

$$\mathbf{H}_h(\text{div}, \tau_h) = \{\mathbf{v}; \mathbf{v}^e \in [\mathbf{H}(\text{div}, e) \cap (P_1(e) \times P_1(e))], \forall e \in \tau_h\}. \quad (4.23)$$

Funkce prostoru $\mathbf{H}_h(\text{div}, \tau_h)$ použijeme pro aproximaci vektoru elektrické indukce na elementech rozkladu.

Prostor $\mathbf{W}_h(\text{div}, \tau_h)$

Symbolem $\mathbf{W}_h(\text{div}, \tau_h)$ označíme množinu tenzorových funkcí z $\mathbf{W}(\text{div}, \tau_h)$, jejichž složky jsou polynomy prvního stupně.

$$\mathbf{W}_h(\text{div}, \tau_h) = \{\mathbf{w}; \mathbf{w}^e \in [\mathbf{W}(\text{div}, e) \cap [P_1(e)]^4], \forall e \in \tau_h\} \quad (4.24)$$

Funkce prostoru $\mathbf{W}_h(\text{div}, \tau_h)$ použijeme pro aproximaci tenzoru mechanického napětí na elementech.

Prostor $H_h^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h)$

Na struktuře stěn Γ_h definujeme prostor $H_h^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h)$ jako množinu těch reálných funkcí z $H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h)$, které jsou stopou některé funkce z prostoru $H_h^1(\Omega)$.

$$H_h^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h) = \{\mu \in H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h); \exists \varphi \in H_h^1(\Omega), \mu = \gamma_h \varphi\} \quad (4.25)$$

Funkce prostoru $H_h^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h)$ použijeme pro aproximaci elektrického potenciálu na stěnách rozkladu.

Prostor $\mathbf{H}_h^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h)$

Prostor $\mathbf{H}_h^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h)$ tvoří takové vektorové funkce definované na struktuře stěn Γ_h , jejichž složky jsou prvky prostoru $H_h^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h)$.

$$\mathbf{H}_h^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h) = H_h^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h) \times H_h^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h) \quad (4.26)$$

Funkce prostor $\mathbf{H}_h^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h)$ použijeme pro aproximaci vektoru mechanického posunutí na stěnách rozkladu.

Poznámka 4.1: Každý z uvedených aproximačních prostorů vymezuje podprostor odpovídajícího prostoru integrovatelných funkcí. Aproximační prostory mají tedy integrální normy shodné s integrálními formami zavedenými pro odpovídající prostory integrovatelných funkcí.

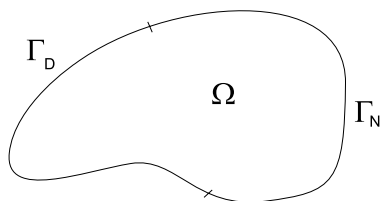
Kapitola 5

Model elektrického pole

Tato kapitola obsahuje odvození modelu pro úlohu výpočtu rozložení elektrických veličin ve vzorku heterogenního anizotropního materiálu vystaveného působení vnějšího elektrického pole. Po stručném shrnutí popisu úlohy jsou postupně uvedeny nejprve smíšená hybridní formulace úlohy a pak její aproximace metodou konečných prvků. Dále je uveden algoritmus generování stavové soustavy.

5.1 Matematická formulace úlohy

Uvažujme vzorek dielektrického materiálu zaujímající oblast $\Omega \subset R^2$ (viz obrázek 5.1). Hranice oblasti $\partial\Omega$ je rozdělena na dvě disjunktní části Γ_D , Γ_N , přičemž



Obrázek 5.1: Modelovaná oblast.

$\bar{\Gamma}_D \cup \bar{\Gamma}_N = \partial\Omega$, $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$ a $\Gamma_D \neq \emptyset$.

Fyzikální model je popsán soustavou parciálních diferenciálních rovnic a okrajových podmínek

$$\mathbf{D} = -\varepsilon \nabla \varphi, \quad \text{v } \Omega, \quad (5.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \varrho, \quad \text{v } \Omega, \quad (5.2)$$

$$\varphi = \varphi_D, \quad \text{na } \Gamma_D, \quad (5.3)$$

$$\mathbf{D} \cdot \mathbf{n} = D_N, \quad \text{na } \Gamma_N. \quad (5.4)$$

Rovnici (5.1) upravíme na tvar

$$\beta \mathbf{D} + \nabla \varphi = 0, \quad (5.5)$$

kde $\beta = \varepsilon^{-1}$ je tenzor elektrické impermeability materiálu.

Hledaným řešením jsou potom funkce φ a \mathbf{D} , které udávají rozložení elektrického potenciálu a elektrické indukce, splňující rovnice (5.1)-(5.4) na oblasti Ω .

Poznámka 5.1: V případě klasického řešení úlohy hledáme funkce $\varphi \in C^1(\Omega) \cap C^0(\bar{\Omega})$ a $\mathbf{D} \in [C^1(\Omega)]^2 \cap [C^0(\bar{\Omega})]^2$. Úlohu lze řešit metodou konečných diferencí. Ta je vhodná pro modelování oblastí s jednoduchou geometrií a homogenními materiálovými vlastnostmi. Cílem disertační práce je uplatnění metody konečných prvků aplikované na smíšenou hybridní formulaci úlohy.

5.2 Smíšená hybridní formulace úlohy

Uvažujeme modelovanou oblast Ω a její rozklad τ_h splňující podmínky stanovené v kapitole 3.3. Rovnice (5.1),(5.2) musí být splněny na celé oblasti Ω a tedy i na libovolné její podoblasti.

Odvodíme nejdříve smíšenou formulaci pro podoblast e . Soustava rovnic pro libovolnou podoblast $e \in \tau_h$ má tvar

$$\beta^e \mathbf{D}^e + \nabla \varphi^e = 0, \quad \text{v } e, \quad (5.6)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D}^e = \varrho^e, \quad \text{v } e, \quad (5.7)$$

kde horní index e vyznačuje restrikcí dané funkce na podoblast e .

Zavedeme testovací funkce

$$\mathbf{v} \in \mathbf{H}(\text{div}, \tau_h), \quad \phi \in L^2(\Omega), \quad (5.8)$$

Funkci \mathbf{v} použijeme jako testovací funkci rovnice (5.6) a ϕ zvolíme jako testovací funkci pro (5.7). Vynásobíme jednotlivé rovnice soustavy příslušnými testovacími funkcemi a provedeme integraci přes celou podoblast e . Soustavu rovnic (5.6)-(5.7) tak transformujeme na integrální rovnice

$$(\beta^e \mathbf{D}^e, \mathbf{v}^e)_e + (\nabla \varphi^e, \mathbf{v}^e)_e = 0 \quad (5.9)$$

$$(\nabla \cdot \mathbf{D}^e, \phi^e)_e = (\varrho^e, \phi^e)_e \quad (5.10)$$

Na druhý člen rovnice (5.9) aplikujeme Greenovu větu a odvodíme

$$(\nabla \varphi^e, \mathbf{v}^e)_e = -(\varphi^e, \nabla \cdot \mathbf{v}^e)_e + \langle \psi^e, \mathbf{v}^e \cdot \mathbf{n}^e \rangle_{\partial e}, \quad (5.11)$$

kde φ^e je elektrický potenciál na podoblasti e a ψ^e je jeho stopa na hranici podoblasti ∂e . Výsledek z (5.11) dosadíme do (5.9) a získáme smíšenou formulaci pro jedinou podoblast e

$$(\beta^e \mathbf{D}^e, \mathbf{v}^e)_e - (\varphi^e, \nabla \cdot \mathbf{v}^e)_e + \langle \psi^e, \mathbf{v}^e \cdot \mathbf{n}^e \rangle_{\partial e} = 0 \quad (5.12)$$

$$(\nabla \cdot \mathbf{D}^e, \phi^e)_e = (\varrho^e, \phi^e)_e. \quad (5.13)$$

Nyní přejdeme k požadavku splnění celé soustavy v součtu přes všechny podoblasti rozkladu.

Soustava (5.12)-(5.13) musí být splněna pro každou podoblast e rozkladu τ_h , musí být tedy splněna i v součtu přes všechny podoblasti. Tedy

$$\sum_{e \in \tau_h} (\beta^e \mathbf{D}^e, \mathbf{v}^e)_e - \sum_{e \in \tau_h} (\varphi^e, \nabla \cdot \mathbf{v}^e)_e + \sum_{e \in \tau_h} \langle \psi^e, \mathbf{v}^e \cdot \mathbf{n}^e \rangle_{\partial e} = 0 \quad (5.14)$$

$$\sum_{e \in \tau_h} (\nabla \cdot \mathbf{D}^e, \phi^e)_e = \sum_{e \in \tau_h} (\varrho^e, \phi^e)_e . \quad (5.15)$$

Dále je nutné doplnit podmínky spojitosti elektrické indukce na mezielementových stěnách τ_h . Uvažujme vnitřní stěnu f , která je společná podoblastem e_k, e_l . Pro vyrovnanou bilanci elektrické indukce na stěně f požadujeme

$$\mathbf{D}_f^{e_k} \cdot \mathbf{n}_f^{e_k} + \mathbf{D}_f^{e_l} \cdot \mathbf{n}_f^{e_l} = \sigma . \quad (5.16)$$

kde σ je hustota elektrického náboje na příslušné stěně. Požadujeme splnění této rovnice ve slabém smyslu. Pro testovací funkci $\mu \in H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h)$ odvodíme

$$\langle \mathbf{D}_f^{e_k} \cdot \mathbf{n}_f^{e_k}, \mu \rangle_f + \langle \mathbf{D}_f^{e_l} \cdot \mathbf{n}_f^{e_l}, \mu \rangle_f = \langle \sigma, \mu \rangle_f . \quad (5.17)$$

V součtu přes všechny vnitřní stěny rozkladu z Γ_h potom obdržíme

$$\sum_{e \in \tau_h} \langle \mathbf{D}^e \cdot \mathbf{n}^e, \mu^e \rangle_{\partial e \cap (\Gamma_h - \Gamma_N)} = \sum_{e \in \tau_h} \langle \sigma^e, \mu^e \rangle_{\partial e \cap (\Gamma_h - \Gamma_N)} . \quad (5.18)$$

Získáme tak soustavu tří rovnic (5.14), (5.15) a (5.18), do kterých nyní zahrneme okrajové podmínky (5.3), (5.4). Na části hranice Γ_D je Dirichletovou okrajovou podmínkou dána hodnota elektrického potenciálu, tedy $\psi^e = \varphi_D^e$ na Γ_D . Na části hranice Γ_N je Neumanovou okrajovou podmínkou dána hodnota $\mathbf{D}^e \cdot \mathbf{n}^e$, tedy indukovaný náboj na dané stěně $\sigma^e = D_N$ na Γ_N . Okrajové podmínky takto uplatníme v rovnicích (5.14) a (5.18) a odvodíme tak výslednou soustavu ve tvaru

$$\begin{aligned} \sum_{e \in \tau_h} (\beta^e \mathbf{D}^e, \mathbf{v}^e)_e - \sum_{e \in \tau_h} (\varphi^e, \nabla \cdot \mathbf{v}^e)_e + \sum_{e \in \tau_h} \langle \psi^e, \mathbf{v}^e \cdot \mathbf{n}^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_h} = \\ = - \sum_{e \in \tau_h} \langle \varphi_D^e, \mathbf{v}^e \cdot \mathbf{n}^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_D} , \end{aligned} \quad (5.19)$$

$$- \sum_{e \in \tau_h} (\nabla \cdot \mathbf{D}^e, \phi^e)_e = - \sum_{e \in \tau_h} (\varrho^e, \phi^e)_e , \quad (5.20)$$

$$\sum_{e \in \tau_h} \langle \mathbf{D}^e \cdot \mathbf{n}^e, \mu^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_h} = \sum_{e \in \tau_h} \langle D_N^e, \mu^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_N} + \sum_{e \in \tau_h} \langle \sigma^e, \mu^e \rangle_{\partial e \cap (\Gamma_h - \Gamma_N)} . \quad (5.21)$$

Zavedeme prostor

$$\mathbf{Z}_E(\tau_h) = \mathbf{H}(\text{div}, \tau_h) \times L^2(\Omega) \times H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h) \quad (5.22)$$

a definujeme bilineární formu charakterizující elektrické vlastnosti dielektrického vzorku

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_E(\tau_h; \hat{\mathbf{z}}, \mathbf{z}) = & \sum_{e \in \tau_h} (\beta^e \mathbf{D}^e, \mathbf{v}^e)_e - \sum_{e \in \tau_h} (\varphi^e, \nabla \cdot \mathbf{v}^e)_e - \sum_{e \in \tau_h} (\nabla \cdot \mathbf{D}^e, \phi^e)_e + \\ & + \sum_{e \in \tau_h} \langle \psi^e, \mathbf{v}^e \cdot \mathbf{n}^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_h} + \sum_{e \in \tau_h} \langle \mathbf{D}^e \cdot \mathbf{n}^e, \mu^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_h} \end{aligned} \quad (5.23)$$

a lineární funkcionál charakterizující elektrické zatížení vzorku

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_E(\tau_h; \mathbf{z}) = & - \sum_{e \in \tau_h} \langle \varphi_D^e, \mathbf{v}^e \cdot \mathbf{n}^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_D} - \sum_{e \in \tau_h} (\varrho^e, \phi^e)_e + \\ & + \sum_{e \in \tau_h} \langle D_N^e, \mu^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_N} + \sum_{e \in \tau_h} \langle \sigma^e, \mu^e \rangle_{\partial e \cap (\Gamma_h - \Gamma_N)}, \end{aligned} \quad (5.24)$$

kde $\mathbf{z} = (\mathbf{v}, \phi, \mu) \in \mathbf{Z}_E(\tau_h)$ a $\hat{\mathbf{z}} = (\mathbf{D}, \varphi, \psi) \in \mathbf{Z}_E(\tau_h)$.

Definice 5.1: *Slabým řešením smíšené hybridní formulace úlohy výpočtu elektrického pole ve feroelektrickém materiálu definovanou fyzikálními rovnicemi (5.1), (5.2) a okrajovými podmínkami (5.3), (5.4) na rozkladu τ_h oblasti Ω nazveme funkci $\hat{\mathbf{z}} = (\mathbf{D}, \varphi, \psi) \in \mathbf{Z}_E(\tau_h)$ která splňuje rovnici*

$$\mathcal{B}_E(\tau_h; \hat{\mathbf{z}}, \mathbf{z}) = \mathcal{Q}_E(\tau_h; \mathbf{z}) \quad (5.25)$$

pro všechny funkce $\mathbf{z} = (\mathbf{v}, \phi, \mu) \in \mathbf{Z}_E(\tau_h)$.

Poznámka 5.2: Tato práce je zaměřena na implementaci formulovaných modelů a není jejím cílem postihnout analýzu řešitelnosti uvedených formulací. Důkaz existence a jednoznačnosti řešení zavedeného definicí 5.1. je v obecné formě uveden například v [6].

5.3 Aproximace úlohy

V dalším kroku aproximujeme hledané veličiny elektrickou indukcí \mathbf{D} , elektrický potenciál φ na elementech a elektrický potenciál ψ na hranách rozkladu τ_h funkcemi \mathbf{D}_h , φ_h a ψ_h .

Nechť \mathbf{Z}_h^E je konečnědimenzionální podprostor prostoru \mathbf{Z}_E a nechť $\mathbf{H}_h(\text{div}, \tau_h)$, $M_h(\tau_h)$, $H_h^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h)$ jsou podprostory prostorů $\mathbf{H}(\text{div}, \tau_h)$, $L^2(\Omega)$, $H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h)$, tedy

$$\mathbf{Z}_h(\tau_h) = \mathbf{H}_h(\text{div}, \tau_h) \times M_h(\tau_h) \times H_h^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h). \quad (5.26)$$

Definice 5.2: *Aproximací smíšené hybridní formulace úlohy výpočtu elektrického pole v dielektrickém materiálu nazveme funkci $\hat{\mathbf{z}}_h = (\mathbf{D}_h, \varphi_h, \psi_h) \in \mathbf{Z}_h^E(\tau_h)$, která splňuje rovnici*

$$\mathcal{B}_E(\tau_h; \hat{\mathbf{z}}_h, \mathbf{z}_h) = \mathcal{Q}_E(\tau_h; \mathbf{z}_h) \quad (5.27)$$

pro všechny funkce $\mathbf{z}_h = (\mathbf{v}_h, \phi_h, \mu_h) \in \mathbf{Z}_h^E(\tau_h)$.

5.4 Aplikace metody konečných prvků

Pomocí metody konečných prvků nyní uvedeme realizaci dané úlohy. Nechť τ_h je systém trojúhelníkových elementů splňující dodatečné podmínky vyslovené v kapitole 3.3. V této kapitole na pevně zvoleném rozkladu vygenerujeme konkrétní konečnědimenzionální prostory, které využijeme k aproximaci úlohy.

5.4.1 Prostory konečných prvků

Symbolem $M^0(e)$ označíme prostor konstantních skalárních funkcí na trojúhelníkovém elementu e s bázovou funkcí ϕ^e definovanou

$$\begin{aligned}\phi^e(\mathbf{x}) &= 1 \text{ pro } \mathbf{x} \in e, \\ \phi^e(\mathbf{x}) &= 0 \text{ pro } \mathbf{x} \notin e.\end{aligned}$$

Pomocí prostoru $M^0(e)$ definujeme prostor $M_{-1}^0(\tau_h)$ jako prostor po elementech konstantních funkcí s bázovými funkcemi ϕ^e , $\forall e \in \tau_h$. Počet bázových funkcí prostoru $M_{-1}^0(\tau_h)$ je roven počtu elementů rozkladu τ_h . Bázové funkce prostoru $M_{-1}^0(\tau_h)$ použijeme pro aproximaci elektrického potenciálu φ na elementech.

Na struktuře stěn Γ_h zavedeme dále prostor pro aproximaci elektrického potenciálu na stěnách z Γ_h . Pro jedinou stěnu $f \in \Gamma_h$ nejprve definujeme prostor $M^0(f)$ jako prostor všech funkcí konstantních na stěně f s bázovou funkcí μ^f definovanou

$$\begin{aligned}\mu^f(\mathbf{x}) &= 1 \text{ pro } \mathbf{x} \in f, \\ \mu^f(\mathbf{x}) &= 0 \text{ pro } \mathbf{x} \notin f.\end{aligned}$$

Dále pak na Γ_h definujeme prostor $M_{-1}^0(\Gamma_h)$ jako prostor po stěnách konstantních funkcí s bázovými funkcemi μ^f , $\forall f \in \Gamma_h$. Počet bázových funkcí prostoru $M_{-1}^0(\Gamma_h)$ je roven počtu všech nedirichletovských stěn rozkladu.

Poznámka 5.3: Prostor $M_{-1}^0(\Gamma_h)$ je vnější aproximací původního prostoru $H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h)$.

K aproximaci vektoru elektrické indukce \mathbf{D} na jediném elementu e použijeme vektorové funkce z prostoru $\mathbf{RT}^0(e)$ definovaném

$$\mathbf{RT}^0(e) = \{\mathbf{v}^e; \mathbf{v}^e(x) = \sum_{i=1}^3 V_i^e \mathbf{v}_i^e(x), x \in e\}, \quad (5.28)$$

s bázovými funkcemi tvaru

$$\mathbf{v}_i^e(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} k_i^e x + a_i^e \\ k_i^e y + b_i^e \end{pmatrix}, \quad \forall i \in \{1, 2, 3\} \quad (5.29)$$

splňujícími podmínky

$$\int_{f_j} \mathbf{v}_i^e \cdot \mathbf{n}_j^e dl = \delta_{ij}, \quad \forall i, j \in \{1, 2, 3\}. \quad (5.30)$$

Na každém elementu jsou tímto definovány tři báze funkce prostoru $\mathbf{RT}^0(e)$. Podmínky (5.30) představují pro každou bázeovou funkci \mathbf{v}_i^e soustavu tří rovnic o třech neznámých k_i^e, a_i^e, b_i^e .

Pomocí prostoru $\mathbf{RT}^0(e)$ definujeme dále prostor $\mathbf{RT}_{-1}^0(\tau_h)$ jako lineární obal $[\mathbf{v}_i^e, i = 1, 2, 3]_\lambda; \forall e \in \tau_h$. Počet bázeových funkcí prostoru $\mathbf{RT}_{-1}^0(\tau_h)$ je roven trojnásobku počtu elementů.

Indexové množiny

Pro další výklad zavedeme indexové množiny bázeových funkcí následujícím způsobem:

- I_b – indexová množina bázeových funkcí $\mathbf{RT}_{-1}^0(\tau_h)$. Mohutnost množiny $|I_b|$ je rovna trojnásobku počtu elementů.
- I_e – indexová množina bázeových funkcí prostoru $M_{-1}^0(\tau_h)$. Mohutnost množiny $|I_e|$ je rovna počtu elementů.
- I_h – indexová množina bázeových funkcí prostoru $M_{-1}^0(\Gamma_h)$. Mohutnost množiny $|I_h|$ je rovna počtu všech nederichletovských stěn rozkladu.

5.4.2 Generování bázeových funkcí prostoru $\mathbf{RT}^0(e)$

Naším úkolem je na trojúhelníkovém elementu e s vrcholy $(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3)$ odvodit koeficienty bázeových funkcí $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3$ tvaru (5.29) tak, aby byly splněny podmínky dané integrálními rovnicemi (5.30). Pro zjednodušení zápisu budou vynechány horní indexy vyznačující příslušnost ke konkrétnímu elementu. Odvození bude provedeno podrobněji pro funkci \mathbf{v}_1 , odvození pro zbývající funkce je analogické.

Hledáme koeficienty k_1, a_1, b_1 funkce

$$\mathbf{v}_1(x, y) = \begin{pmatrix} k_1 x + a_1 \\ k_1 y + b_1 \end{pmatrix}, \quad (5.31)$$

takové, aby byly splněny podmínky

$$\int_{f_1} \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{n}_1 dl = 1, \quad \int_{f_2} \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{n}_2 dl = 0, \quad \int_{f_3} \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{n}_3 dl = 0, \quad (5.32)$$

kde normálové vektory $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_3$ jsou dány vztahy

$$\mathbf{n}_1 = \frac{1}{l_1} \begin{pmatrix} y_2 - y_1 \\ x_1 - x_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{n}_2 = \frac{1}{l_2} \begin{pmatrix} y_3 - y_2 \\ x_2 - x_3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{n}_3 = \frac{1}{l_3} \begin{pmatrix} y_1 - y_3 \\ x_3 - x_1 \end{pmatrix}, \quad (5.33)$$

kde l_1, l_2, l_3 jsou délky stěn f_1, f_2, f_3 . Jednolivé stěny vyjádříme parametrickými rovnicemi příslušných přímek

$$\begin{aligned} f_1 : \quad x &= x_1 + (x_2 - x_1)t \\ y &= y_1 + (y_2 - y_1)t , \end{aligned} \quad (5.34)$$

$$\begin{aligned} f_2 : \quad x &= x_2 + (x_3 - x_2)t \\ y &= y_2 + (y_3 - y_2)t , \end{aligned} \quad (5.35)$$

$$\begin{aligned} f_3 : \quad x &= x_3 + (x_1 - x_3)t \\ y &= y_3 + (y_1 - y_3)t , \end{aligned} \quad (5.36)$$

kde t je parametr, který pro libovolný bod příslušné stěny nabývá hodnot $t \in \langle 0, 1 \rangle$. Dosazením (5.31) spolu s (5.33) do podmínek (5.32) s využitím (5.34) - (5.36) a následnou integrací obdržíme soustavu tří rovnic o třech neznámých

$$\begin{aligned} k_1(x_1y_2 - x_2y_1) + 2a_1(y_2 - y_1) + 2b_1(x_1 - x_2) &= 2 \\ k_1(x_2y_3 - x_3y_2) + 2a_1(y_3 - y_2) + 2b_1(x_2 - x_3) &= 0 \\ k_1(x_3y_1 - x_1y_3) + 2a_1(y_1 - y_3) + 2b_1(x_3 - x_1) &= 0 \end{aligned} \quad (5.37)$$

Řešením získáme hodnoty hledaných neznámých

$$k_1 = \frac{1}{P} , \quad a_1 = -\frac{x_3}{P} , \quad b_1 = -\frac{y_3}{P} , \quad (5.38)$$

kde hodnota P daná výrazem

$$P = x_1(y_2 - y_3) + x_2(y_3 - y_1) + x_3(y_1 - y_2) \quad (5.39)$$

odpovídá dvojnásobku plochy elementu. Řešení pro funkce $\mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3$ je potom analogicky dáno výrazy

$$k_2 = \frac{1}{P} , \quad a_2 = -\frac{x_1}{P} , \quad b_2 = -\frac{y_1}{P} , \quad (5.40)$$

$$k_3 = \frac{1}{P} , \quad a_3 = -\frac{x_2}{P} , \quad b_3 = -\frac{y_2}{P} . \quad (5.41)$$

Je zřejmé, že řešení existuje pro každý nedegenerovaný element ($P \neq 0$).

5.4.3 Stavová matice soustavy

Nyní využijeme definované prostory konečných prvků následujícím způsobem

$$\mathbf{D}_h(\mathbf{x}) \in \mathbf{RT}_{-1}^0(e) , \quad \varphi_h(\mathbf{x}) \in M_{-1}^0(\tau_h) , \quad \psi_h(\mathbf{x}) \in M_{-1}^0(\Gamma_h)$$

a hledané funkce na rozkladu τ_h vyjádříme pomocí báзовých funkcí jednotlivých prostorů ve tvaru

$$\mathbf{D}_h(\mathbf{x}) = \sum_{i \in I_b} V_i \mathbf{v}_i , \quad \varphi_h(\mathbf{x}) = \sum_{i \in I_e} \Phi_i \phi_i , \quad \psi_h(\mathbf{x}) = \sum_{i \in I_h} \Psi_i \mu_i , \quad (5.42)$$

kde $\mathbf{v}_i, \phi_i, \mu_i$ jsou bázové funkce jednotlivých prostorů a V_i, Φ_i, Ψ_i jsou hledanými neznámými.

Pro testování rovnic soustavy použijeme bázové funkce jednotlivých aproximačních prostorů, tedy

$$\mathbf{v}_h(\mathbf{x}) \in \mathbf{RT}_{-1}^0(e), \quad \phi_h(\mathbf{x}) \in M_{-1}^0(\tau_h), \quad \mu_h(\mathbf{x}) \in M_{-1}^0(\Gamma_h). \quad (5.43)$$

S využitím takto zavedených funkcí transformujeme soustavu rovnic na tvar

$$\begin{aligned} \sum_{l \in I_b} (\beta(V_l \mathbf{v}_l), \mathbf{v}_i)_{e(l)} - \sum_{j \in I_e} (\Phi_j \phi_j, \nabla \cdot \mathbf{v}_i)_{e_j} + \sum_{k \in I_h} \langle \Psi_k \mu_k, \mathbf{n}_k \cdot \mathbf{v}_i \rangle_{f_k} = \\ = -\langle \varphi_D, \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_i \rangle_{\Gamma_D}, \quad \forall i \in I_b, \end{aligned} \quad (5.44)$$

$$\sum_{l \in I_b} -(\nabla \cdot (V_l \mathbf{v}_l), \phi_j)_{e_l} = -(\varrho, \phi_j)_\Omega, \quad \forall j \in I_e, \quad (5.45)$$

$$\sum_{l \in I_b} \langle \mathbf{n}_k \cdot (V_l \mathbf{v}_l), \mu_k \rangle_{f_l} = \langle D_N, \mu_k \rangle_{\Gamma_N} + \langle \sigma, \mu_k \rangle_{\Gamma_h - \Gamma_N}, \quad \forall k \in I_h, \quad (5.46)$$

kde $e(l)$ je element na kterém je definována bázová funkce \mathbf{v}_l . V_l, Φ_j a Ψ_k jsou konstanty, tedy je můžeme z jednotlivých integrálních forem vytknout. Zároveň využijeme vlastnosti skalárního součinu a celou soustavu rovnic transformujeme na tvar

$$\begin{aligned} \sum_{l \in I_b} V_l (\beta \mathbf{v}_l, \mathbf{v}_i)_{e(l)} - \sum_{j \in I_e} \Phi_j (\nabla \cdot \mathbf{v}_i, \phi_j)_{e_j} + \sum_{k \in I_h} \Psi_k \langle \mathbf{n}_k \cdot \mathbf{v}_i, \mu_k \rangle_{f_k} = \\ = -\langle \varphi_D, \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_i \rangle_{\Gamma_D}, \quad \forall i \in I_b, \end{aligned} \quad (5.47)$$

$$-\sum_{l \in I_b} V_l (\nabla \cdot \mathbf{v}_l, \phi_j)_{e(l)} = -(\varrho, \phi_j)_\Omega, \quad \forall j \in I_e, \quad (5.48)$$

$$\sum_{l \in I_b} V_l \langle \mathbf{n}_k \cdot \mathbf{v}_l, \mu_k \rangle_{f_l} = \langle D_N, \mu_k \rangle_{\Gamma_N} + \langle \sigma, \mu_k \rangle_{\Gamma_h - \Gamma_N}, \quad \forall k \in I_h. \quad (5.49)$$

Soustava rovnic je symetrická a můžeme ji zapsat v přehlednějším maticovém tvaru

$$\begin{aligned} \mathbb{A} \mathbf{V} + \mathbb{B} \Phi + \mathbb{C} \Psi &= \mathbf{q}_1 \\ \mathbb{B}^T \mathbf{V} &= \mathbf{q}_2, \\ \mathbb{C}^T \mathbf{V} &= \mathbf{q}_3 \end{aligned} \quad (5.50)$$

kde \mathbf{V}, Φ a Ψ

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} V_1 \\ \vdots \\ V_{|I_b|} \end{pmatrix}, \quad \Phi = \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \vdots \\ \Phi_{|I_e|} \end{pmatrix}, \quad \Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \vdots \\ \Psi_{|I_h|} \end{pmatrix}, \quad (5.51)$$

jsou vektory hledaného řešení, $\mathbb{A}, \mathbb{B}, \mathbb{C}$ jsou matice koeficientů a $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3$ části vektoru pravé strany.

5.4.4 Algoritmus sestavení stavové matice

V této části vysvětlíme podrobněji postup generování jednotlivých bloků stavové matice soustavy (5.50).

Blok \mathbb{A}

Blok \mathbb{A} je čtvercová matice velikosti $|I_b| \times |I_b|$, je symetrická pozitivně definitní a obsahuje skalární součiny

$$(\beta \mathbf{v}_r, \mathbf{v}_s)_{e(s)} , \quad (5.52)$$

kde $\mathbf{v}_r, \mathbf{v}_s$ jsou báze vektorové funkce prostoru $\mathbf{RT}_{-1}^0(\tau_h)$

$$\mathbf{v}_r = \begin{pmatrix} k_r x + a_r \\ k_r y + b_r \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_s = \begin{pmatrix} k_s x + a_s \\ k_s y + b_s \end{pmatrix} \quad (5.53)$$

a β je symetrický tenzor druhého řádu

$$\beta = \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ \beta_{21} & \beta_{22} \end{pmatrix} \quad (5.54)$$

Jednotlivé skalární součiny jsou nenulové pouze v případě, že obě báze funkce jsou definovány na stejném elementu $e(r) = e(s)$. Vyčíslení nenulových členů vede potom k výpočtu integrálu polynomu druhého stupně na trojúhelníkové oblasti

$$(\beta \mathbf{v}_r, \mathbf{v}_s)_e = \int_e \beta \mathbf{v}_r \cdot \mathbf{v}_s dx = \int_e G(x) dx \quad (5.55)$$

kde $G(x)$ je polynom druhého stupně tvaru

$$G(x) = g_0 + g_1 x + g_2 y + g_3 x^2 + g_4 xy + g_5 y^2 \quad (5.56)$$

s využitím vlastnosti symetrie tenzoru β vypočteme koeficienty polynomu $G(x)$ ze vztahů

$$g_0 = \beta_{11} a_r a_s + \beta_{12} (a_r b_s + b_r a_s) + \beta_{22} b_r b_s , \quad (5.57)$$

$$g_1 = \beta_{11} (k_r a_s + k_s a_r) + \beta_{12} (k_r b_s + k_s b_r) , \quad (5.58)$$

$$g_2 = \beta_{12} (k_r a_s + k_s a_r) + \beta_{22} (k_r b_s + k_s b_r) , \quad (5.59)$$

$$g_3 = \beta_{11} k_r k_s , \quad (5.60)$$

$$g_4 = 2 \beta_{12} k_r k_s , \quad (5.61)$$

$$g_5 = \beta_{22} k_r k_s . \quad (5.62)$$

Integrál kvadratické funkce na trojúhelníkové oblasti vypočteme podle vztahu

$$\int_e G(x) dx = \frac{1}{3} [G(x_{12}, y_{12}) + G(x_{23}, y_{23}) + G(x_{31}, y_{31})] S(e) , \quad (5.63)$$

kde

$$x_{ij} = \frac{x_i + x_j}{2}, \quad y_{ij} = \frac{y_i + y_j}{2}, \quad i, j \in \{1, 2, 3\} \quad (5.64)$$

jsou souřadnice středů stěn a $S(e)$ je plocha trojúhelníkového elementu e .

Vhodným řazení jednotlivých rovnic soustavy lze docílit, že blok \mathbb{A} má vnitřní blokovou strukturu a obsahuje nenulové subbloky velikosti 3×3 podél hlavní diagonály.

Blok \mathbb{B}

Blok \mathbb{B} je matice velikosti $|I_b| \times |I_e|$. Obsahuje integrální členy

$$-(\nabla \cdot \mathbf{v}_r, \phi_s)_e, \quad (5.65)$$

kde \mathbf{v}_r je báze funkce prostoru $\mathbf{RT}_{-1}^0(\tau_h)$ a ϕ_s je báze funkce prostoru $M_{-1}^0(\tau_h)$. Jednotlivé prvky matice jsou nenulové pouze v případě, že \mathbf{v}_r a ϕ_s jsou definovány na stejném elementu. S využitím tvaru báze vektorové funkce \mathbf{v}_r a hodnoty báze funkce ϕ_s vyčíslíme nenulové členy bloku

$$\begin{aligned} -(\nabla \cdot \mathbf{v}_r, \phi_s)_e &= - \int_e \nabla \cdot \mathbf{v}_r \phi_s dx = \\ &= - \int_e \left[\frac{\partial(k_r x + a_r)}{\partial x} + \frac{\partial(k_r y + b_r)}{\partial y} \right] \phi_s dx = \\ &= -2k_r \int_e \phi_s dx = -\frac{2}{2S(e)} S(e) = -1. \end{aligned} \quad (5.66)$$

Blok \mathbb{B} má vnitřní blokovou strukturu. Obsahuje nenulové subbloky velikosti 3×1 diagonálně uspořádané v rámci bloku \mathbb{B} .

Blok \mathbb{C}

Blok \mathbb{C} má velikost $|I_b| \times |I_h|$. Obsahuje integrální členy

$$\langle \mathbf{n}_k \cdot \mathbf{v}_i, \mu_k \rangle_f, \quad (5.67)$$

kde \mathbf{v}_i je báze funkce prostoru $\mathbf{RT}_{-1}^0(\tau_h)$ a μ_k je báze funkce prostoru $M_{-1}^0(\Gamma_h)$. Jednotlivé prvky matice jsou nenulové pouze v případě, že báze funkce \mathbf{v} má nenulový (dle definice jednotkový) tok stěnou, pro níž je definována báze funkce μ . Hodnota nenulových členů je rovna 1.

$$\langle \mathbf{n}_k \cdot \mathbf{v}_i, \mu_k \rangle_f = \int_f \mathbf{n}_k \cdot \mathbf{v}_i \mu_k dl = \int_f \mathbf{n}_k \cdot \mathbf{v}_i dl = 1 \quad (5.68)$$

Každý sloupec bloku \mathbb{C} příslušející vnitřní hraně má dva nenulové členy, zatímco sloupce příslušející vnějším hranám, na kterých je definována Neumanova okrajová podmínka, mají po jednom nenulovém členu.

Vektor \mathbf{q}_1

Počet řádků vektoru \mathbf{q}_1 odpovídá trojnásobku počtu elementů rozkladu. Obsahuje integrální členy tvaru

$$-\langle \varphi_D, \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_i \rangle_f , \quad (5.69)$$

kde φ_D je hodnota Dirichletovy okrajové podmínky na stěně f (pokud je na této stěně zadána), \mathbf{v}_i je bázová funkce prostoru $\mathbf{RT}_{-1}^0(\tau_h)$ a \mathbf{n} je normálový vektor stěny f . Jednotlivé prvky jsou nenulové pouze v případě, že na stěně, přes kterou má bázová funkce \mathbf{v}_i jednotkový tok, je zadána nenulová Dirichletova okrajová podmínka. Na těchto stěnách je potom hodnota členu rovna

$$-\langle \varphi_D, \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_i \rangle_f = - \int_f \varphi_D \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_i dl = -\varphi_D . \quad (5.70)$$

Vektor \mathbf{q}_2

Počet řádků vektoru \mathbf{q}_2 odpovídá počtu elementů. Obsahuje integrální členy tvaru

$$-(\varrho, \phi_j)_e , \quad (5.71)$$

kde ϱ je hustota volného náboje a ϕ_j je bázová funkce prostoru $M_{-1}^0(\tau_h)$. Jednotlivé prvky jsou nenulové pouze v případě, že na příslušném elementu je nenulová hustota volného náboje. Vyčíslením získáme pro nenulové členy hodnotu

$$-(\varrho, \phi_j)_e = - \int_e \varrho \phi_j dx = \varrho S(e) \quad (5.72)$$

kde $S(e)$ je plocha elementu. Výsledná hodnota má význam celkového množství volného náboje na elementu.

Vektor \mathbf{q}_3

Počet řádků vektoru \mathbf{q}_3 je roven počtu nederichletovských hran. Obsahuje členy tvaru

$$\langle D_N, \mu_k \rangle_f + \langle \sigma, \mu_k \rangle_f , \quad (5.73)$$

kde μ je bázová funkce prostoru $M_{-1}^0(\Gamma_h)$, D_N je hodnota Neumanovy okrajové podmínky a σ je hustota elektrického náboje na stěně f .

V řádcích příslušejících vnějším stěnám se vyskytuje nenulová hodnota pouze v případě, že na této stěně je zadána nenulová Neumanova podmínka, potom

$$\langle D_N, \mu_k \rangle_f + \langle \sigma, \mu_k \rangle_f = \langle D_N, \mu_k \rangle_f = \int_h D_N \mu_k dl = D_N l \quad (5.74)$$

V řádcích příslušejících vnitřním stěnám rozkladu se vyskytují nenulové hodnoty pouze v případě, že na přílušné stěně je nenulová hustota elektrického náboje, potom

$$\langle D_N, \mu_k \rangle_f + \langle \sigma, \mu_k \rangle_f = \langle \sigma, \mu_k \rangle_f = \int_h \sigma \mu_k dl = \sigma l \quad (5.75)$$

kde l je délka stěny f . Výsledná hodnota má v obou případech význam množství indukovaného náboje na stěně f .

5.4.5 Vektor řešení

Řešením soustavy rovnic konkrétní úlohy obdržíme hodnoty vektorů \mathbf{V} , Φ , Ψ .

Vektor Φ

Vektor Φ obsahuje hodnoty, které vyjadřují výsledný elektrický potenciál v těžištích jednotlivých elementů.

Vektor Ψ

Vektor Ψ obsahuje hodnoty, které vyjadřují výsledný elektrický potenciál ve středech jednotlivých nedirichletovských hran rozkladu.

Vektor \mathbf{V}

Vektor \mathbf{V} obsahuje hodnoty, které vyjadřují toky vektoru elektrické indukce přes jednotlivé stěny elementů. Pro každý element obsahuje vektor \mathbf{V} tři hodnoty pro vyčíslení elektrické indukce na elementu.

Nechť elementu e s těžištěm v bodě (x^T, y^T) a bázovými funkcemi \mathbf{v}_i , \mathbf{v}_j , \mathbf{v}_k prostoru $\mathbf{RT}_{-1}^0(\tau_h)$ příslušejí hodnoty V_i , V_j , V_k vektoru \mathbf{V} . Potom elektrická indukce \mathbf{D} na elementu e je lineární kombinací bázových funkcí

$$\mathbf{D}^e(x, y) = V_i \mathbf{v}_i + V_j \mathbf{v}_j + V_k \mathbf{v}_k . \quad (5.76)$$

Hodnotu elektrické indukce v těžišti elementu vypočteme

$$\mathbf{D}^e(x^T, y^T) = V_i \mathbf{v}_i(x^T, y^T) + V_j \mathbf{v}_j(x^T, y^T) + V_k \mathbf{v}_k(x^T, y^T) . \quad (5.77)$$

Na základě vyčísleného vektoru elektrické indukce můžeme následně vypočítat hodnotu intenzity elektrického pole

$$\mathbf{E}^e(x^T, y^T) = \beta^e \mathbf{D}^e(x^T, y^T) \quad (5.78)$$

a hodnotu elektrické polarizace v těžišti elementu

$$\mathbf{P}^e(x^T, y^T) = \mathbf{D}^e(x^T, y^T) - \varepsilon_0 \mathbf{E}^e(x^T, y^T) . \quad (5.79)$$

Kapitola 6

Model elastického pole

V této kapitole odvodíme model pro úlohu výpočtu elastického pole v anizotropním heterogenním elastickém materiálu vystaveném působení vnějších mechanických sil. Základní postup odvození je obdobný jako v kapitole 5.

6.1 Matematická formulace úlohy

Uvažujme vzorek elastického materiálu zaujímající oblast $\Omega \subset R^2$. Fyzikální model elastických vlastností je popsán parciálními diferenciálními rovnicemi ve tvaru

$$s_{ijkl}T_{kl} - S_{ij} = 0, \quad \text{v } \Omega, \quad (6.1)$$

$$\frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} = 0, \quad i = 1, 2, \quad \text{v } \Omega, \quad (6.2)$$

kde složky tenzoru deformace jsou definovány vztahem

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (6.3)$$

Nechť na hranici modelované oblasti jsou zadány okrajové podmínky tvaru

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_D, \quad \text{na } \Gamma_{DM} \quad (6.4)$$

$$T_{ij} \cdot n_j = T_{iN}, \quad i = 1, 2, \quad \text{na } \Gamma_{NM} \quad (6.5)$$

kde Γ_{DM} je část hranice oblasti, na které je dána výše uvedená Dirichletova okrajová podmínka a Γ_{NM} je část hranice, na které je zadána uvedená Neumanova okrajová podmínka. Požadujeme, aby

$$\Gamma_{DM} \cap \Gamma_{NM} = \emptyset, \quad \bar{\Gamma}_{DM} \cup \bar{\Gamma}_{NM} = \partial\Omega, \quad \Gamma_{DM} \neq \emptyset. \quad (6.6)$$

Hledaným řešením je rozložení tenzoru mechanického napětí \mathbf{T} a vektoru mechanického posunutí \mathbf{u} v oblasti Ω .

6.2 Smíšená hybridní formulace úlohy

Předpokládáme rozklad τ_h oblasti Ω definovaný v kapitole 3.3. Symbolem Γ_{hM} označíme všechny stěny rozkladu τ_h , na kterých není zadána Dirichletova okrajová podmínka. Zavedeme testovací funkce

$$\mathbf{w} \in \mathbf{W}(\text{div}, \tau_h) , \quad \varpi \in \mathbf{L}^2(\Omega) , \quad \nu \in \mathbf{H}^{\frac{1}{2}}(\Gamma_{hM}) .$$

Uvažujme rovnice (6.1), (6.2) na podoblasti e . Vynásobením rovnic zavedenými testovacími funkcemi a integrací přes celou podoblast e obdržíme soustavu ve tvaru

$$(s_{ijkl}^e T_{kl}^e, w_{ij}^e)_e - (S_{ij}^e, w_{ij}^e)_e = 0 , \quad (6.7)$$

$$\left(\frac{\partial T_{ij}^e}{\partial x_j}, \varpi_i^e \right)_e = 0 , \quad (6.8)$$

Upravíme člen $(S_{ij}^e, w_{ij}^e)_e$ z rovnice (6.7). Dosadíme za hodnotu mechanické deformace z rovnice (6.3), aplikujeme Greenovu větu a využijeme symetrie tenzoru deformace a testovacích tenzorových funkcí w_{ij}^e . Hodnoty posunutí na stěnách elementu odlišíme symbolem λ . Výraz tak postupně upravíme

$$\begin{aligned} (S_{ij}^e, w_{ij}^e)_e &= \int_e \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 S_{ij}^e w_{ij}^e dx = \\ &= \int_e \left(\frac{\partial u_1^e}{\partial x_1} w_{11}^e + \frac{\partial u_1^e}{\partial x_2} w_{12}^e + \frac{\partial u_2^e}{\partial x_1} w_{21}^e + \frac{\partial u_2^e}{\partial x_2} w_{22}^e \right) dx = \\ &= - \left(u_1^e, \frac{\partial w_{1j}^e}{\partial x_j} \right)_e - \left(u_2^e, \frac{\partial w_{2j}^e}{\partial x_j} \right)_e + \\ &\quad + \langle \lambda_1^e, w_{1j}^e \cdot n_j^e \rangle_{\partial e} + \langle \lambda_2^e, w_{2j}^e \cdot n_j^e \rangle_{\partial e} = \\ &= - \left(u_i^e, \frac{\partial w_{ij}^e}{\partial x_j} \right)_e + \langle \lambda_i^e, w_{ij}^e \cdot n_j^e \rangle_{\partial e} \end{aligned} \quad (6.9)$$

Výsledný tvar z (6.9) dosadíme zpět do (6.7). Pro jedinou podoblast e rozkladu τ_h obdržíme soustavu rovnic tvaru

$$(s_{ijkl}^e T_{kl}^e, w_{ij}^e)_e + \left(u_i^e, \frac{\partial w_{ij}^e}{\partial x_j} \right)_e - \langle \lambda_i^e, w_{ij}^e \cdot n_j^e \rangle_{\partial e} = 0 , \quad (6.10)$$

$$\left(\frac{\partial T_{ij}^e}{\partial x_j}, \varpi_i^e \right)_e = 0 , \quad (6.11)$$

Nyní přejdeme k součtovému tvaru rovnic přes všechny podoblasti rozkladu. Při tomto kroku je nutné uvažovat vazby mezi jednotlivými podoblastmi a doplnit podmínku pro bilanci tenzoru napětí na vnitřních stěnách rozkladu. Uvažujme stěnu f , která je společná podoblastem e_k, e_l . Na každé takové stěně rozkladu musí být splněny podmínky rovnováhy sil

$$T_{ij}^{e_k} \cdot n_j^{e_k} + T_{ij}^{e_l} \cdot n_j^{e_l} = 0 . \quad (6.12)$$

Provedeme vynásobení rovnice (6.12) funkcí $\nu \in \mathbf{H}^{\frac{1}{2}}(\Gamma_{hM})$, integraci přes celou podoblast e a v součtu přes všechny podoblasti rozkladu obdržíme podmínku pro vnitřní stěny

$$\sum_{e \in \tau_{hM}} \langle T_{ij}^e \cdot n_j^e, \nu_i^e \rangle_{\partial e \cap (\Gamma_{hM} - \Gamma_{NM})} = 0. \quad (6.13)$$

Pro celou oblast Ω tak obdržíme soustavu rovnic tvaru

$$\sum_{e \in \tau_h} (s_{ijkl}^e T_{kl}^e, w_{ij}^e)_e + \sum_{e \in \tau_h} \left(u_i, \frac{\partial w_{ij}^e}{\partial x_j} \right)_e - \sum_{e \in \tau_h} \langle \lambda_i, w_{ij}^e \cdot n_j^e \rangle_{\partial e} = 0 \quad (6.14)$$

$$\sum_{e \in \tau_h} \left(\frac{\partial T_{ij}^e}{\partial x_j}, \varpi_i^e \right)_e = 0 \quad (6.15)$$

$$- \sum_{e \in \tau_h} \langle T_{ij}^e \cdot n_j^e, \nu_i^e \rangle_{\partial e \cap (\Gamma_{hM} - \Gamma_{NM})} = 0 \quad (6.16)$$

Nyní použijeme okrajové podmínky (6.4), (6.5). Podmínkou (6.4) je na části hranice Γ_{DM} dána hodnota mechanického posunutí, tedy $\lambda_i = u_{iD}$ na Γ_{DM} . (6.4) stanovuje podmínku pro $T_{ij}^e \cdot n_j^e$ na vnějších stěnách z Γ_{hM} . Obdobnou podmínku pro vnitřní stěny z Γ_{hM} vyjadřuje rovnice (6.16). Neumanovu okrajovou podmínku tedy zahrneme do rovnice (6.16) jejím rozšířením na všechny stěny Γ_{hM} . Výsledná soustava má potom tvar

$$\begin{aligned} \sum_{e \in \tau_h} (s_{ijkl}^e T_{kl}^e, w_{ij}^e)_e + \sum_{e \in \tau_h} \left(u_i, \frac{\partial w_{ij}^e}{\partial x_j} \right)_e - \sum_{e \in \tau_h} \langle \lambda_i, w_{ij}^e \cdot n_j^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{hM}} = \\ = \sum_{e \in \tau_h} \langle u_{iD}, w_{ij}^e \cdot n_j^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{DM}} \end{aligned} \quad (6.17)$$

$$\sum_{e \in \tau_h} \left(\frac{\partial T_{ij}^e}{\partial x_j}, \varpi_i^e \right)_e = 0 \quad (6.18)$$

$$- \sum_{e \in \tau_h} \langle T_{ij}^e \cdot n_j^e, \nu_i^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{hM}} = - \sum_{e \in \tau_h} \langle T_{iN}^e, \nu^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{NM}} \quad (6.19)$$

Zavedeme prostor

$$\mathbf{Z}_M(\tau_h) = \mathbf{W}(\text{div}, \tau_h) \times \mathbf{L}^2(\Omega) \times \mathbf{H}^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h) \quad (6.20)$$

a definujeme bilineární formu charakterizující mechanické vlastnosti vzorku elastického materiálu

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_M(\tau_h; \hat{\mathbf{z}}, \mathbf{z}) = & \sum_{e \in \tau_h} (s_{ijkl}^e T_{kl}^e, w_{ij}^e)_e + \sum_{e \in \tau_h} \left(u_i, \frac{\partial w_{ij}^e}{\partial x_j} \right)_e + \sum_{e \in \tau_h} \left(\frac{\partial T_{ij}^e}{\partial x_j}, \varpi_i^e \right)_e - \\ & - \sum_{e \in \tau_h} \langle \lambda_i, w_{ij}^e \cdot n_j^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{hM}} - \sum_{e \in \tau_h} \langle T_{ij}^e \cdot n_j^e, \nu_i^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{hM}} \end{aligned} \quad (6.21)$$

a lineární funkcionál charakterizující mechanické zatížení vzorku

$$\mathcal{Q}_M(\tau_h; \mathbf{z}) = \sum_{e \in \tau_h} \langle u_{iD}, w_{ij}^e \cdot n_j^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{DM}} - \sum_{e \in \tau_h} \langle T_{iN}^e, \nu^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{NM}}, \quad (6.22)$$

kde $\mathbf{z} = (\mathbf{w}, \varpi, \nu) \in \mathbf{Z}_M(\tau_h)$ a $\hat{\mathbf{z}} = (\mathbf{T}, \mathbf{u}, \lambda) \in \mathbf{Z}_M(\tau_h)$.

Definice 6.1: *Slabým řešením smíšené hybridní formulace úlohy výpočtu elastického pole v elastickém materiálu definovanou fyzikálními rovnicemi (6.1), (6.2) a okrajovými podmínkami (6.4), (6.5) na rozkladu τ_h oblasti Ω nazveme funkci $\hat{\mathbf{z}} = (\mathbf{T}, \mathbf{u}, \lambda) \in \mathbf{Z}_M(\tau_h)$ která splňuje rovnici*

$$\mathcal{B}_M(\tau_h; \hat{\mathbf{z}}, \mathbf{z}) = \mathcal{Q}_M(\tau_h; \mathbf{z}) \quad (6.23)$$

pro všechny funkce $\mathbf{z} = (\mathbf{w}, \varpi, \nu) \in \mathbf{Z}_M(\tau_h)$.

Poznámka 6.1: Tato práce je zaměřena na implementaci formulovaných modelů a není jejím cílem postihnout analýzu řešitelnosti uvedených formulací. Důkaz existence a jednoznačnosti řešení zavedeného definicí 6.1. je v obecné formě uveden například v [6].

6.3 Aproximace úlohy

Nyní provedeme aproximaci mechanického napětí \mathbf{T} , mechanického posunutí na podoblastech \mathbf{u} a na hranách λ rozkladu τ_h funkcemi \mathbf{T}_h , \mathbf{u}_h a λ_h .

Nechť \mathbf{Z}_h^M je konečnědimenzionální podprostor prostoru \mathbf{Z}_M a nechť $\mathbf{W}_h(\text{div}, \tau_h)$, $\mathbf{M}_h(\tau_h)$, $\mathbf{H}_h^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h)$ jsou podprostory prostorů $\mathbf{W}(\text{div}, \tau_h)$, $\mathbf{L}^2(\Omega)$, $\mathbf{H}^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h)$, tedy

$$\mathbf{Z}_h^M(\tau_h) = \mathbf{W}_h(\text{div}, \tau_h) \times \mathbf{M}_h(\tau_h) \times \mathbf{H}_h^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h). \quad (6.24)$$

Definice 6.2: *Aproximací smíšené hybridní formulace úlohy výpočtu elastického pole v elastickém materiálu nazveme funkci $\hat{\mathbf{z}}_h = (\mathbf{T}_h, \mathbf{u}_h, \lambda_h) \in \mathbf{Z}_h^M(\tau_h)$, která splňuje rovnici*

$$\mathcal{B}_M(\tau_h; \hat{\mathbf{z}}_h, \mathbf{z}_h) = \mathcal{Q}_M(\tau_h; \mathbf{z}_h) \quad (6.25)$$

pro všechny funkce $\mathbf{z}_h = (\mathbf{w}_h, \varpi_h, \nu_h) \in \mathbf{Z}_h^M(\tau_h)$.

6.4 Aplikace metody konečných prvků

Obdobně jako v kapitole 5.4 nyní pomocí metody konečných prvků uvedeme konkrétní realizaci dané úlohy. Nechť τ_h je systém trojúhelníkových elementů splňující dodatečné podmínky vyslovené v kapitole 3.3. V této kapitole na pevně zvoleném rozkladu vygenerujeme konečnědimenzionální prostory, které využijeme k aproximaci úlohy.

6.4.1 Prostory konečných prvků

Symbolem $\mathbf{M}^0(e)$ označíme prostor konstantních vektorových funkcí na trojúhelníkovém elementu e s bázovými funkcemi $\varpi^{e,1}$, $\varpi^{e,2}$ definovanými

$$\begin{aligned}\varpi^{e,1}(\mathbf{x}) &= (1, 0) \text{ pro } \mathbf{x} \in e, \\ \varpi^{e,2}(\mathbf{x}) &= (0, 1) \text{ pro } \mathbf{x} \in e, \\ \varpi^{e,i}(\mathbf{x}) &= (0, 0) \text{ pro } \mathbf{x} \notin e.\end{aligned}$$

Potom prostor $\mathbf{M}_{-1}^0(\tau_h)$ je prostor po elementech konstantních vektorových funkcí s bázovými funkcemi $\varpi^{e,i}$, $\forall e \in \tau_h$, $i = 1, 2$. Počet bázových funkcí prostoru $\mathbf{M}_{-1}^0(\tau_h)$ je roven dvojnásobku počtu elementů rozkladu τ_h . Bázové funkce prostoru $\mathbf{M}_{-1}^0(\tau_h)$ použijeme pro aproximaci vektoru mechanického posunutí \mathbf{u} na elementech.

Symbolem $\mathbf{M}^0(f)$ označíme prostor konstantních vektorových funkcí na stěně f s bázovými funkcemi $\nu^{f,1}$, $\nu^{f,2}$ definovanými

$$\begin{aligned}\nu^{f,1}(\mathbf{x}) &= (1, 0) \text{ pro } \mathbf{x} \in f, \\ \nu^{f,2}(\mathbf{x}) &= (0, 1) \text{ pro } \mathbf{x} \in f, \\ \nu^{f,i}(\mathbf{x}) &= (0, 0) \text{ pro } \mathbf{x} \notin f.\end{aligned}$$

Potom prostor $\mathbf{M}_{-1}^0(\Gamma_h)$ je prostor po elementech konstantních vektorových funkcí s bázovými funkcemi $\nu^{f,i}$, $\forall f \in \Gamma_h$, $i = 1, 2$. Počet bázových funkcí prostoru $\mathbf{M}_{-1}^0(\Gamma_h)$ je roven dvojnásobku počtu nedirichletovských stěn Γ_{hM} . Bázové funkce prostoru $\mathbf{M}_{-1}^0(\Gamma_h)$ použijeme pro aproximaci vektoru mechanického posunutí na stěnách rozkladu.

Symbolem $\mathbf{RTT}^0(e)$ označíme množinu lineárních symetrických tenzorových funkcí na elementu e s bázovými funkcemi $\mathbf{w}^{e,1}$, $\mathbf{w}^{e,2}$, $\mathbf{w}^{e,3}$, $\mathbf{w}^{e,4}$, $\mathbf{w}^{e,5}$, $\mathbf{w}^{e,6}$, které pro odvození budeme uvažovat v obecném tvaru

$$\mathbf{w}^{e,i}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \alpha_1^{e,i}x + \alpha_2^{e,i}y + \alpha_3^{e,i} & \alpha_7^{e,i}x + \alpha_8^{e,i}y + \alpha_9^{e,i} \\ \alpha_7^{e,i}x + \alpha_8^{e,i}y + \alpha_9^{e,i} & \alpha_4^{e,i}x + \alpha_5^{e,i}y + \alpha_6^{e,i} \end{pmatrix}. \quad (6.26)$$

Pro tyto funkce budeme požadovat splnění následujících šesti podmínek

$$\int_{f_j} \mathbf{w}^{e,i} \cdot \mathbf{n}_j^e dl = \begin{cases} (\delta_{ij}, 0) & \text{pro } i \in \{1, 2, 3\}, \mathbf{x} \in e \\ (0, \delta_{ij}) & \text{pro } i \in \{4, 5, 6\}, \mathbf{x} \in e \\ (0, 0) & \text{pro } \mathbf{x} \notin e \end{cases}, \quad (6.27)$$

kde \mathbf{n}_j^e je vnější normálový vektor stěny f_j na elementu e . Různé varianty doplnění dalších tří podmínek budou diskutovány v kapitole 6.4.5.

Symbolem $\mathbf{RTT}_{-1}^0(\tau_h)$ označíme prostor všech funkcí z $\mathbf{W}(\text{div}, \tau_h)$, které jsou na každém elementu e prvkem příslušného prostoru $\mathbf{RTT}^0(e)$

$$\mathbf{RTT}_{-1}^0(\tau_h) = \{\mathbf{w} \in \mathbf{W}(\text{div}, \tau_h); \mathbf{w}^e \in \mathbf{RTT}^0(e); \forall e \in \tau_h\} \quad (6.28)$$

Prostoru $\mathbf{RTT}_{-1}^0(\tau_h)$ má na každém elementu e šest bázových funkcí $\mathbf{w}^{e,i}$, $i = 1, 2, \dots, 6$. Celkový počet bázových funkcí prostoru $\mathbf{RTT}_{-1}^0(\tau_h)$ je roven šestinásobku počtu elementů rozkladu. Bázové funkce prostoru $\mathbf{RTT}_{-1}^0(\tau_h)$ použijeme pro aproximaci tenzoru mechanického napětí na elementech.

Indexové množiny

Pro další výklad zavedeme indexové množiny bázových funkcí následujícím způsobem:

- J_w – indexová množina bázových funkcí prostoru $\mathbf{RTT}_{-1}^0(\tau_h)$. Mohutnost množiny $|J_w|$ je rovna šestinásobku počtu elementů.
- J_u – indexová množina bázových funkcí prostoru $\mathbf{M}_{-1}^0(\tau_h)$. Mohutnost množiny $|J_u|$ je rovna dvojnásobku počtu elementů.
- J_h – indexová množina bázových funkcí prostoru $\mathbf{M}_{-1}^0(\Gamma_h)$. Mohutnost množiny $|J_h|$ je rovna dvojnásobku počtu všech nederichletovských stěn rozkladu.

6.4.2 Stavová matice soustavy

Zavedeme aproximaci hledaných funkcí

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_h(\mathbf{x}) &\in \mathbf{RTT}_{-1}^0(e), \quad \mathbf{u}_h(\mathbf{x}) \in \mathbf{M}_{-1}^0(\tau_h), \quad \lambda_h(\mathbf{x}) \in \mathbf{M}_{-1}^0(\Gamma_h) \\ \mathbf{T}_h(\mathbf{x}) &= \sum_{j \in J_w} W_j \mathbf{w}^j, \quad \mathbf{u}_h(\mathbf{x}) = \sum_{j \in J_u} U_j \varpi^j, \quad \lambda_h(\mathbf{x}) = \sum_{j \in J_h} \Lambda_j \nu^j, \end{aligned} \quad (6.29)$$

kde \mathbf{w}^j , ϖ^j , ν^j jsou bázové funkce jednotlivých prostorů a W_j , U_j , Λ_j jsou konstanty představující hledané řešení.

Takto zavedenou aproximaci hledaných veličin dosadíme do soustavy rovnic (6.14)-(6.16) a zároveň využijeme bázové funkce prostorů $\mathbf{RTT}_{-1}^0(e)$, $\mathbf{M}_{-1}^0(\tau_h)$, $\mathbf{M}_{-1}^0(\Gamma_h)$ pro testování jednotlivých rovnic soustavy. Soustavu rovnic (6.14)-(6.16) tak transformujeme do výsledného tvaru

$$\begin{aligned} \sum_{s \in J_w} W_s (s_{ijkl} w_{kl}^s, w_{ij}^r)_{e(s)} + \sum_{s \in J_u} U_s \left(\varpi_i^s, \frac{\partial w_{ij}^r}{\partial x_j} \right)_{e(s)} - \\ - \sum_{s \in J_h} \Lambda_s \langle \nu_i^s, w_{ij}^r \cdot n_j \rangle_{f(s)} = \langle u_{iD}, w_{ij}^r \cdot n_j \rangle_{\Gamma_{DM}}, \quad \forall r \in J_w \end{aligned} \quad (6.30)$$

$$\sum_{s \in J_w} W_s \left(\frac{\partial w_{ij}^s}{\partial x_j}, \varpi_i^r \right)_{e(s)} = 0, \quad \forall r \in J_u \quad (6.31)$$

$$- \sum_{s \in J_w} W_s \langle w_{ij}^s \cdot n_j, \nu_i^r \rangle_{h(s)} = - \langle T_{iN}, \nu_i^s \rangle_{\Gamma_{NM}}, \quad \forall r \in J_h \quad (6.32)$$

Soustava (6.30) - (6.32) je soustava lineárních algebraických rovnic se symetrickou řídkou maticí. Soustavu lze zapsat v přehlednějším maticovém tvaru

$$\begin{aligned} \mathbf{F} \mathbf{W} + \mathbf{G} \mathbf{U} + \mathbf{H} \mathbf{\Lambda} &= \mathbf{q}_4 \\ \mathbf{G}^T \mathbf{W} &= \mathbf{0} \\ \mathbf{H}^T \mathbf{W} &= \mathbf{q}_5 \end{aligned}, \quad (6.33)$$

kde \mathbf{W} , \mathbf{U} a $\mathbf{\Lambda}$

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} W_1 \\ \vdots \\ W_{|J_w|} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U} = \begin{pmatrix} U_1 \\ \vdots \\ U_{|J_u|} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} \Lambda_1 \\ \vdots \\ \Lambda_{|J_h|} \end{pmatrix}, \quad (6.34)$$

jsou vektory hledaného řešení, \mathbb{F} , \mathbb{G} , \mathbb{H} jsou bloky matice soustavy a \mathbf{q}_4 , \mathbf{q}_5 jsou části vektoru pravé strany.

6.4.3 Algoritmus sestavení stavové matice

V této kapitole uvedeme postup generování jednotlivých bloků soustavy (6.33).

Blok \mathbb{F}

Blok \mathbb{F} má velikost $|J_w| \times |J_w|$. Obsahuje integrální členy

$$(s_{ijkl}w_{kl}^r, w_{ij}^s)_{e(r)}, \quad (6.35)$$

kteřé jsou nenulové pouze v případě že funkce \mathbf{w}^r , \mathbf{w}^s jsou bázovými funkcemi definovanými na stejném elementu. Blok \mathbb{F} má vnitřní blokovou strukturu – obsahuje nenulové subbloky velikosti 6×6 rozložené podél diagonály bloku \mathbb{F} . Při vyčíslení nenulových členů bloku využijeme maticového zápisu tenzorových funkcí a materiálového tenzoru. Tedy

$$(s_{ijkl}w_{kl}^r, w_{ij}^s)_{e(r)} = (s_{mn}w_n^r, w_m^s)_{e(r)}, \\ i, j, k, l \in \{1, 2\}, m, n \in \{1, 2, 3\}$$

kde

$$s = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{1111} & s_{1122} & 2 s_{1112} \\ s_{2211} & s_{2222} & 2 s_{2212} \\ 2 s_{1211} & 2 s_{1222} & 4 s_{1212} \end{pmatrix}, \quad s_{nm} = s_{mn}$$

a bázové funkce:

$$w^r = \begin{pmatrix} \alpha_1 x + \alpha_2 y + \alpha_3 \\ \alpha_4 x + \alpha_5 y + \alpha_6 \\ \alpha_7 x + \alpha_8 y + \alpha_9 \end{pmatrix}, \quad w^s = \begin{pmatrix} \gamma_1 x + \gamma_2 y + \gamma_3 \\ \gamma_4 x + \gamma_5 y + \gamma_6 \\ \gamma_7 x + \gamma_8 y + \gamma_9 \end{pmatrix}. \quad (6.36)$$

Hodnota jednotlivých nenulových členů bloku je

$$(s_{mn}w_n^r, w_m^s)_e = \int_e \sum_{m=1}^3 \sum_{n=1}^3 s_{mn}w_n^r, w_m^s dx dy = \int_e G(x, y) dx dy, \quad (6.37)$$

kde $G(x, y)$ je polynom druhého stupně tvaru

$$G(x, y) = g_0 + g_1 x + g_2 y + g_3 x^2 + g_4 xy + g_5 y^2, \quad (6.38)$$

jehož jednotlivé koeficienty jsou rovny

$$\begin{aligned} g_0 = & s_{11}\alpha_3\gamma_3 + s_{22}\alpha_6\gamma_6 + s_{33}\alpha_9\gamma_9 + \\ & + s_{12}(\alpha_3\gamma_6 + \alpha_6\gamma_3) + s_{13}(\alpha_3\gamma_9 + \alpha_9\gamma_3) + s_{23}(\alpha_6\gamma_9 + \alpha_9\gamma_6) \end{aligned} \quad (6.39)$$

$$\begin{aligned} g_1 = & s_{11}(\alpha_1\gamma_3 + \alpha_3\gamma_1) + s_{12}(\alpha_1\gamma_6 + \alpha_6\gamma_1) + s_{12}(\alpha_4\gamma_3 + \alpha_3\gamma_4) + \\ & + s_{13}(\alpha_1\gamma_9 + \alpha_9\gamma_1) + s_{13}(\alpha_7\gamma_3 + \alpha_3\gamma_7) + s_{22}(\alpha_4\gamma_6 + \alpha_6\gamma_4) + \\ & + s_{23}(\alpha_4\gamma_9 + \alpha_9\gamma_4) + s_{23}(\alpha_7\gamma_6 + \alpha_6\gamma_7) + s_{33}(\alpha_7\gamma_9 + \alpha_9\gamma_7) + \end{aligned} \quad (6.40)$$

$$\begin{aligned} g_2 = & s_{11}(\alpha_2\gamma_3 + \alpha_3\gamma_2) + s_{12}(\alpha_2\gamma_6 + \alpha_6\gamma_2) + s_{12}(\alpha_5\gamma_3 + \alpha_3\gamma_5) + \\ & + s_{13}(\alpha_2\gamma_9 + \alpha_9\gamma_2) + s_{13}(\alpha_8\gamma_3 + \alpha_3\gamma_8) + s_{22}(\alpha_5\gamma_6 + \alpha_6\gamma_5) + \\ & + s_{23}(\alpha_5\gamma_9 + \alpha_9\gamma_5) + s_{23}(\alpha_8\gamma_6 + \alpha_6\gamma_8) + s_{33}(\alpha_8\gamma_9 + \alpha_9\gamma_8) + \end{aligned} \quad (6.41)$$

$$\begin{aligned} g_3 = & s_{11}\alpha_1\gamma_1 + s_{12}(\alpha_1\gamma_4 + \alpha_4\gamma_1) + s_{13}(\alpha_1\gamma_7 + \alpha_7\gamma_1) + \\ & + s_{22}\alpha_4\gamma_4 + s_{23}(\alpha_4\gamma_7 + \alpha_7\gamma_4) + s_{33}\alpha_7\gamma_7 \end{aligned} \quad (6.42)$$

$$\begin{aligned} g_4 = & s_{11}(\alpha_1\gamma_2 + \alpha_2\gamma_1) + s_{12}(\alpha_2\gamma_4 + \alpha_2\gamma_2) + s_{12}(\alpha_1\gamma_5 + \alpha_5\gamma_1) + \\ & + s_{13}(\alpha_2\gamma_7 + \alpha_7\gamma_2) + s_{13}(\alpha_1\gamma_8 + \alpha_8\gamma_1) + s_{22}(\alpha_4\gamma_5 + \alpha_5\gamma_4) + \\ & + s_{23}(\alpha_5\gamma_7 + \alpha_7\gamma_5) + s_{23}(\alpha_4\gamma_8 + \alpha_8\gamma_4) + s_{33}(\alpha_7\gamma_8 + \alpha_8\gamma_7) + \end{aligned} \quad (6.43)$$

$$\begin{aligned} g_5 = & s_{11}\alpha_2\gamma_2 + s_{12}(\alpha_2\gamma_5 + \alpha_5\gamma_2) + s_{13}(\alpha_2\gamma_8 + \alpha_8\gamma_2) + \\ & + s_{22}\alpha_5\gamma_5 + s_{23}(\alpha_5\gamma_8 + \alpha_8\gamma_5) + s_{33}\alpha_8\gamma_8 \end{aligned} \quad (6.44)$$

Hodnotu integrálu polynomu druhého stupně $G(x, y)$ na trojúhelníkovém elementu vypočteme podle vztahu (5.63).

Blok \mathbb{G}

Blok \mathbb{G} je velikosti $|J_w| \times |J_u|$, obsahuje integrální členy tvaru

$$\left(\varpi_i^s, \frac{\partial w_{ij}^r}{\partial x_j} \right)_{e(s)} \quad (6.45)$$

Má vnitřní blokovou strukturu. Obsahuje subbloky velikosti 6×2 tvaru

$$\begin{pmatrix} 1, & 1, & 1, & 0, & 0, & 0 \\ 0, & 0, & 0, & 1, & 1, & 1 \end{pmatrix}^T, \quad (6.46)$$

diagonálně uspořádané v bloku \mathbb{G} .

Blok \mathbb{H}

Blok \mathbb{H} má velikost $|J_w| \times |J_h|$ a obsahuje integrální členy tvaru

$$-\langle \nu_i^s, w_{ij}^r \cdot n_j \cdot \rangle_h \quad (6.47)$$

Každý sloupec tohoto bloku příslušející vnitřní hraně rozkladu obsahuje dva nenulové členy, zatímco sloupce příslušející vnějším nedirichletovským hranám obsahují vždy po jednom nenulovém členu. Nenulové členy mají hodnotu -1 .

Vektor \mathbf{q}_4

Vektor \mathbf{q}_4 má délku rovnou $|J_w|$ a obsahuje integrální členy tvaru

$$\langle u_{iD}, w_{ij}^r \cdot n_j \rangle_{\Gamma_{DM}} \cdot \quad (6.48)$$

Každý řádek vektoru náleží jediné funkci \mathbf{w}^r , která má nenulový tok (viz podmínky (6.27)) pouze stěnou f^r . Nenulové hodnoty jsou potom pouze v řádcích, které odpovídají vnějším stěnám se zadanou Dirichletovou podmínkou. Pro funkce $\mathbf{w}^{e,1}$, $\mathbf{w}^{e,2}$, $\mathbf{w}^{e,3}$ na elementu e je potom hodnota rovna

$$\langle u_{1D}, w_{1j}^r \cdot n_j \rangle_{\Gamma_{DM}} + \langle u_{2D}, w_{2j}^r \cdot n_j \rangle_{\Gamma_{DM}} = u_{1D} \cdot, \quad (6.49)$$

zatímco pro funkce $\mathbf{w}^{e,4}$, $\mathbf{w}^{e,5}$, $\mathbf{w}^{e,6}$ získáme vyčíslením hodnotu

$$\langle u_{1D}, w_{1j}^r \cdot n_j \rangle_{\Gamma_{DM}} + \langle u_{2D}, w_{2j}^r \cdot n_j \rangle_{\Gamma_{DM}} = u_{2D} \cdot \quad (6.50)$$

Vektor \mathbf{q}_5

Vektor \mathbf{q}_5 má délku $|J_h|$ a obsahuje integrální členy tvaru

$$-\langle T_{iN}, \nu_i^r \rangle_{\Gamma_{NM}} \cdot \quad (6.51)$$

Nenulové členy mohou být pouze v řádcích vektoru, které odpovídají vnějším hranám z Γ_{NM} (hrany na kterých je zadána Neumanova okrajová podmínka). Hodnotu nenulových členů vypočítáme

$$-\langle T_{iN}, \nu_i^r \rangle_{\Gamma_{NM}} = - \int_f T_{iN} \nu_i^r dl = -T_{iN} l_f \cdot, \quad (6.52)$$

kde l_f je délka příslušné stěny.

6.4.4 Vektor řešení

Řešením soustavy rovnic konkrétní úlohy obdržíme hodnoty vektorů \mathbf{W} , \mathbf{U} , $\mathbf{\Lambda}$.

Vektor \mathbf{U}

Vektor \mathbf{U} obsahuje pro každý element rozkladu dvě hodnoty vyjadřující složky vektoru mechanického posunutí ve směrech os x a y v těžišti daného elementu.

Vektor Λ

Vektor Λ obsahuje pro každou nederichletovskou hranu rozkladu dvě hodnoty vyjadřující složky vektoru mechanického posunutí ve směrech os x a y ve středu dané hrany.

Vektor \mathbf{W}

Vektor \mathbf{W} obsahuje pro každý element 6 hodnot pro výpočet tenzoru mechanického posunutí na daném elementu. Nechť elementu e s těžištěm v bodě (x^T, y^T) a báзовými funkcemi \mathbf{w}^{i+j} , $j = 0, 1, \dots, 5$ přísluší hodnoty W_{i+j} , $j = 0, 1, \dots, 5$, vektoru \mathbf{W} . Potom tenzor mechanického napětí na elementu e je lineární kombinací báзовých funkcí

$$T_{kl}^e(x, y) = \sum_{j=0}^5 W_{i+j} \mathbf{w}_{kl}^{i+j} . \quad (6.53)$$

Hodnota tenzoru napětí v těžišti elementu je rovna

$$T_{kl}^e(x^T, y^T) = \sum_{j=0}^5 W_{i+j} \mathbf{w}_{kl}^{i+j}(x^T, y^T) . \quad (6.54)$$

Ze známého tenzoru mechanického napětí je potom možno dle Hookova zákona vyčíslit tenzor mechanické deformace.

6.4.5 Generování báze prostoru tenzorových funkcí

V kapitole 6.4.1 byl uveden obecný tvar báзовých funkcí prostoru $\mathbf{RTT}_{-1}^0(\tau_h)$. V této kapitole si rozebereme některé možné postupy generování báze zavedeného prostoru. Problematika generování báзовých tenzorových funkcí je vzhledem k požadavku symetrie podstatně složitější, než tomu bylo u báze prostoru vektorových funkcí.

Obecná báзовá funkce tvaru (6.26) má celkem devět koeficientů, přitom podmínky (6.27) představují pro jedinou báзовou funkci soustavu šesti rovnic. V souvislosti s hledáním vhodného tvaru báze byla provedena rozsáhlá řešerše, která ovšem nepřinesla konkrétní návod na řešení daného problému. Většina publikací tématiky orientovaných na modelování mechanických vlastností vycházející ze smíšené hybridní formulace problému je zaměřena na vlastní matematickou formulaci (viz například [3], [10], [23], [29]). V některých případech je potom zmíněna i problematika aproximace úlohy ([1], [2], [11], [14]) s obecným popisem tvaru báзовých funkcí, ovšem nikoli s uvedením jejich konkrétního tvaru a funkcionalů pro jejich generování tak, aby bylo možné provést srovnání.

V průběhu hledání vhodného tvaru báze bylo postupně testováno několik možností. Nejprve byly uvažovány báзовé tenzorové funkce tvaru

$$\mathbf{w}^{e,i}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \alpha_1 x + \alpha_3 & \alpha_7 x + \alpha_8 y + \alpha_9 \\ \alpha_7 x + \alpha_8 y + \alpha_9 & \alpha_1 y + \alpha_6 \end{pmatrix} . \quad (6.55)$$

Každá taková funkce má šest stupňů volnosti. U funkcí tohoto tvaru byla pozorována značná citlivost na poloze konkrétního elementu. V některých singulárních případech není možné řešení vygenerovat. Funkce tvaru (6.55) je možné použít pro ošetřené typy sítí. Případně by bylo možné generovat bázi těchto funkcí na vhodném referenčním trojúhelníku a řešení pak transformovat na jednotlivé elementy sítě.

Dále bylo uvažováno doplnění původních šesti funkcionálů (6.27) o další tři podmínky a generování báze funkcí v plném tvaru (6.26). Dodatečné podmínky byly voleny tak, aby příslušná báze měla nulovou hodnotu v jednom z vrcholů trojúhelníkového elementu, na kterém je generována. Při testování se ovšem prokázala nevhodnost takto generované báze. Aproximace pomocí těchto funkcí vedla k větším chybám, které nebyly analyzovány.

Jednou z možností řešení je upuštění od požadavku symetrie báze funkcí (uveďeno například v [3]), je ovšem třeba jí uvažovat již ve fázi formulace modelu. Formulace používaná v této práci je založená na symetrii tenzorových funkcí.

Další z možností je využití takzvaných „kompozitních elementů“ (viz například [14]). V tomto případě je každý element e rozdělen na tři subelementy. Hledáme pak báze funkce po částech lineární na jednotlivých subelementech. Tento způsob generování báze symetrických tenzorových funkcí je uveden například V tomto případě se opět naskýtá více možností stanovení vzájemných vazeb mezi subelementy, redukce počtu nezávislých koeficientů a doplnění podmínek.

V této práci byl testován i další způsob generování báze a to na základě báze vektorových funkcí prostoru $\mathbf{RT}_{-1}^0(\tau_h)$ jejich prostým rozšířením na symetrický tenzor. Takovýmto způsobem ovšem není možné v obecném případě zajistit splnění všech podmínek (6.27), což má za následek dodatečné nenulové členy v bloku \mathbb{H} a změnu topologie stavové matice.

V oblasti generování báze symetrických tenzorových funkcí je řada otevřených otázek. Jedná se o složitý problém, který by si zasloužil další studium.

Kapitola 7

Model elektroelastického pole

V této kapitole je uvedena formulace modelu úlohy výpočtu rozložení elektroelastického pole ve vzorku feroelektrického materiálu vystaveném vnějšímu elektrickému a mechanickému působení.

Dílčí modely elektrického a elastického pole byly postupně odvozeny v kapitolách 5 a 6. Model elektroelastického pole v sobě obsahuje oba tyto modely a dále vzájemnou vazbu mezi elektrickými a mechanickými veličinami. V této části je vynecháno podrobné odvození jednotlivých vztahů, které byly odvozeny v předcházejících kapitolách. Výklad je soustředěn na uvedení výsledných formulací a na odvození bloku propojující mechanické a elektrické vlastnosti.

7.1 Matematická formulace úlohy

Uvažujme vzorek heterogenního anizotropního feroelektrického materiálu zaujímající oblast $\Omega \subset R^2$. Fyzikální model modelovaného vzorku je popsán piezoelektrickými stavovými rovnicemi ve tvaru

$$s_{ijkl}T_{kl} + g_{nij}D_n - S_{ij} = 0, \quad (7.1)$$

$$g_{mkl}T_{kl} - \beta_{nm}D_n + E_m = 0, \quad (7.2)$$

kde složky tenzoru mechanické deformace a složky vektoru intenzity elektrického pole jsou definovány vztahem

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad E_m = -\frac{\partial \varphi}{\partial x_m} \quad (7.3)$$

a tenzor mechanického napětí a vektor elektrické indukce splňují podmínky rovnováhy

$$\frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} = 0, \quad \frac{\partial D_j}{\partial x_j} = \varrho. \quad (7.4)$$

Požadujeme splnění těchto rovnic v celé oblasti Ω .

Dále předpokládáme zadání Dirichletových okrajových podmínek pro elektrický potenciál φ a pro složky vektoru mechanického posunutí \mathbf{u} na části hranice

$$u_i = u_{iD}, \quad \text{na } \Gamma_{DM}, \quad (7.5)$$

$$\varphi = \varphi_D, \quad \text{na } \Gamma_{DE} \quad (7.6)$$

a zadání Neumanových okrajových podmínek

$$T_{ij}.n_j = T_{iN}, \quad \text{na } \Gamma_{NM}, \quad (7.7)$$

$$D_j.n_j = D_N, \quad \text{na } \Gamma_{NE}, \quad (7.8)$$

kde Γ_{DM} je část hranice oblasti, na které je dána Dirichletova okrajová podmínka pro mechanickou část, Γ_{NM} je část hranice, na které je zadána Neumanova okrajová podmínka pro mechanickou část, Γ_{DE} je část hranice, na které je zadána Dirichletova okrajová podmínka pro elektrickou část a Γ_{NE} je část hranice na které je zadána Neumanova okrajová podmínka. Požadujeme, aby:

$$\begin{aligned} \Gamma_{DM} \cap \Gamma_{NM} &= \emptyset, & \Gamma_{DE} \cap \Gamma_{NE} &= \emptyset, \\ \bar{\Gamma}_{DM} \cup \bar{\Gamma}_{NM} &= \partial\Omega, & \bar{\Gamma}_{DE} \cup \bar{\Gamma}_{NE} &= \partial\Omega, \\ \Gamma_{DM} &\neq \emptyset, & \Gamma_{DE} &\neq \emptyset. \end{aligned}$$

Uvažujeme i případy, kdy doménové stěny v modelovaném feroelektrickém vzorku mohou mít nenulovou hustotu plošného náboje σ .

Hledaným řešením je rozložení tenzoru mechanického napětí \mathbf{T} , vektoru mechanického posunutí \mathbf{u} , vektoru elektrické indukce \mathbf{D} a elektrického potenciálu φ na sledované oblasti Ω .

7.2 Smíšená hybridní formulace

Předpokládáme rozklad oblasti τ_h na systém na podoblasti e (viz kapitola 3.3). Symbolem Γ_{hM} označíme všechny stěny rozkladu τ_h , na kterých není zadána Dirichletova okrajová podmínka pro mechanické posunutí \mathbf{u} , a symbolem Γ_{hE} všechny stěny rozkladu τ_h , na kterých není zadána Dirichletova okrajová podmínka pro elektrický potenciál φ .

Odbobným postupem jako v kapitolách 5.2 a 6.2 odvodíme smíšenou hybridní formulaci úlohy definované vztahy (7.1) - (7.8). Provedeme postupně:

- Zavedení testovacích funkcí.
- Odvození soustavy rovnic pro jedinou podoblast rozkladu. Tento krok zahrnuje násobení rovnic příslušnými testovacími funkcemi integrací přes podoblast e a aplikaci Greenovy formule na členy rovnic obsahující parciální derivace elektrického potenciálu a mechanického posunutí. Výsledkem je slabá formulace úlohy pro jedinou podoblast rozkladu.

- Přechod k součtovému tvaru rovnic v součtu přes všechny podoblasti e rozkladu τ_h se zahrnutím podmínek vyrovnané bilance tenzoru mechanického napětí a vektoru elektrické indukce mezi jednotlivými podoblastmi (na vnitřních stěnách rozkladu).
- Použití okrajových podmínek (7.5) - (7.8). Výsledkem tohoto kroku je smíšená hybridní formulace úlohy definované vztahy (7.1) - (7.8).

Postupným vykonáním uvedených kroků odvodíme pro τ_h modelované oblasti Ω soustavu rovnic ve tvaru

$$\begin{aligned}
\sum_{e \in \tau_h} (s_{ijkl}^e T_{kl}^e, w_{ij}^e)_e &+ \sum_{e \in \tau_h} (g_{nij}^e D_n^e, w_{ij}^e)_e + \sum_{e \in \tau_h} \left(u_i, \frac{\partial w_{ij}^e}{\partial x_j} \right)_e - \\
&- \sum_{e \in \tau_h} \langle \lambda_i, w_{ij}^e \cdot n_j^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{hM}} = \\
&= \sum_{e \in \tau_h} \langle u_{iD}, w_{ij}^e \cdot n_j^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{DM}} \quad (7.9)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{e \in \tau_h} (g_{mkl}^e T_{kl}^e, v_m^e)_e &- \sum_{e \in \tau_h} (\beta_{nm}^e D_n^e, v_m^e)_e + \sum_{e \in \tau_h} \left(\varphi^e, \frac{\partial v_m^e}{\partial x_m} \right)_e - \\
&- \sum_{e \in \tau_h} \langle \psi^e, v_m^e \cdot n_m^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{hE}} = \\
&= \sum_{e \in \tau_h} \langle \varphi_D, v_m^e \cdot n_m^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{DE}} \quad (7.10)
\end{aligned}$$

$$\sum_{e \in \tau_h} \left(\frac{\partial T_{ij}^e}{\partial x_j}, \varpi_i^e \right)_e = 0 \quad (7.11)$$

$$\sum_{e \in \tau_h} \left(\frac{\partial D_j^e}{\partial x_j}, \phi^e \right)_e = \sum_{e \in \tau_h} (\varrho^e, \phi^e)_e \quad (7.12)$$

$$-\sum_{e \in \tau_h} \langle T_{ij}^e \cdot n_j^e, \nu_i^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{hM}} = -\sum_{e \in \tau_h} \langle T_{iN}^e, \nu_i^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{NM}} \quad (7.13)$$

$$\begin{aligned}
-\sum_{e \in \tau_h} \langle D_j^e \cdot n_j^e, \mu^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{hE}} &= -\sum_{e \in \tau_h} \langle D_N^e, \mu^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{NE}} - \\
&- \sum_{e \in \tau_h} \langle \sigma^e, \mu^e \rangle_{\partial e \cap (\Gamma_{hE} - \Gamma_{NE})} \quad (7.14)
\end{aligned}$$

Zavedeme prostor

$$\mathbf{Z}_P(\tau_h) = \mathbf{W}(\text{div}, \tau_h) \times \mathbf{L}^2(\Omega) \times \mathbf{H}^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h) \times \mathbf{H}(\text{div}, \tau_h) \times L^2(\Omega) \times H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h) \quad (7.15)$$

a definujeme bilineární formu charakterizující elektromechanické vlastnosti vzorku feroelektrického materiálu

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}_P(\tau_h; \hat{\mathbf{z}}, \mathbf{z}) = & \sum_{e \in \tau_h} (s_{ijkl}^e T_{kl}^e, w_{ij}^e)_e + \sum_{e \in \tau_h} (g_{nij}^e D_n^e, w_{ij}^e)_e + \\
& + \sum_{e \in \tau_h} \left(u_i, \frac{\partial w_{ij}^e}{\partial x_j} \right)_e + \sum_{e \in \tau_h} \left(\frac{\partial T_{ij}^e}{\partial x_j}, \varpi_i^e \right)_e + \\
& + \sum_{e \in \tau_h} (g_{mkl}^e T_{kl}^e, v_m^e)_e - \sum_{e \in \tau_h} (\beta_{nm}^e D_n^e, v_m^e)_e \\
& + \sum_{e \in \tau_h} \left(\varphi^e, \frac{\partial v_m^e}{\partial x_m} \right)_e + \sum_{e \in \tau_h} \left(\frac{\partial D_j^e}{\partial x_j}, \phi^e \right)_e - \\
& - \sum_{e \in \tau_h} \langle \lambda_i, w_{ij}^e \cdot n_j^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{hM}} - \sum_{e \in \tau_h} \langle T_{ij}^e \cdot n_j^e, \nu_i^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{hM}} - \\
& - \sum_{e \in \tau_h} \langle \psi^e, v_m^e \cdot n_m^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{hE}} - \sum_{e \in \tau_h} \langle D_j^e \cdot n_j^e, \mu^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{hE}} \quad (7.16)
\end{aligned}$$

a lineární funkcionál charakterizující elektrické a mechanické zatížení vzorku

$$\begin{aligned}
\mathcal{Q}_P(\tau_h; \mathbf{z}) = & \sum_{e \in \tau_h} \langle u_{iD}, w_{ij}^e \cdot n_j^e \rangle_{0, \partial e \cap \Gamma_{DM}} - \sum_{e \in \tau_h} \langle T_{iN}^e, \nu^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{NM}} + \\
& + \sum_{e \in \tau_h} \langle \varphi_D, v_m^e \cdot n_m^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{DE}} + \sum_{e \in \tau_h} (\varrho^e, \phi^e)_e - \\
& - \sum_{e \in \tau_h} \langle D_N^e, \mu^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{NE}} - \sum_{e \in \tau_h} \langle \sigma^e, \mu^e \rangle_{\partial e \cap (\Gamma_{hE} - \Gamma_{NE})} \quad (7.17)
\end{aligned}$$

kde $\mathbf{z} = (\mathbf{w}, \varpi, \nu, \mathbf{v}, \phi, \mu) \in \mathbf{Z}_P(\tau_h)$ a $\hat{\mathbf{z}} = (\mathbf{T}, \mathbf{u}, \lambda, \mathbf{D}, \varphi, \psi) \in \mathbf{Z}_P(\tau_h)$.

Definice 7.1: *Slabým řešením smíšené hybridní formulace úlohy výpočtu elektroelastického pole ve feroelektrickém materiálu definovanou fyzikálními zákony (7.1)-(7.4) a okrajovými podmínkami (7.5)-(7.8) na rozkladu τ_h oblasti Ω nazveme funkci $\hat{\mathbf{z}} = (\mathbf{T}, \mathbf{u}, \lambda, \mathbf{D}, \varphi, \psi) \in \mathbf{Z}_P(\tau_h)$ která splňuje rovnici*

$$\mathcal{B}_P(\tau_h; \hat{\mathbf{z}}, \mathbf{z}) = \mathcal{Q}_P(\tau_h; \mathbf{z}) \quad (7.18)$$

pro všechny funkce $\mathbf{z} = (\mathbf{w}, \varpi, \nu, \mathbf{v}, \phi, \mu) \in \mathbf{Z}_P(\tau_h)$.

7.3 Aproximace úlohy

Nyní provedeme aproximaci mechanického napětí \mathbf{T} , elektrické indukce \mathbf{D} , a mechanického posunutí \mathbf{u} a λ a elektrického potenciálu φ a ψ na podoblastech i na hranách rozkladu τ_h funkcemi $\mathbf{T}_h, \mathbf{D}_h, \mathbf{u}_h, \lambda_h, \varphi_h$ a ψ_h . Zavedeme prostor \mathbf{Z}_h^P

$$\mathbf{Z}_h(\tau_h) = \mathbf{W}_h(\text{div}, \tau_h) \times \mathbf{M}_h(\tau_h) \times \mathbf{H}_h^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h) \times \mathbf{H}_h(\text{div}, \tau_h) \times M_h(\tau_h) \times H_h^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h) .$$

Definice 7.2: Aproximací smíšené hybridní formulace úlohy výpočtu elektroelastického pole ve feroelektrickém materiálu nazveme funkci

$\hat{\mathbf{z}}_h = (\mathbf{T}_h, \mathbf{u}_h, \lambda_h, \mathbf{D}_h, \varphi_h, \psi_h) \in \mathbf{Z}_h^P(\tau_h)$, která splňuje rovnici

$$\mathcal{B}_P(\tau_h; \hat{\mathbf{z}}_h, \mathbf{z}_h) = \mathcal{Q}_P(\tau_h; \mathbf{z}_h) \quad (7.19)$$

pro všechny funkce $\mathbf{z}_h = (\mathbf{w}_h, \varpi_h, \nu_h, \mathbf{v}_h, \phi_h, \mu_h) \in \mathbf{Z}_h^P(\tau_h)$.

7.4 Aplikace metody konečných prvků

Nyní pomocí metody konečných prvků uvedeme konkrétní realizaci dané úlohy. Jednotlivé hledané funkce aproximujeme bázovými funkcemi uvedenými v kapitolách 5.4.1, 6.4.1 a zavedeme aproximaci (5.42), (6.29). Rovněž pro testování rovnic soustavy použijeme bázové funkce jednotlivých aproximačních prostorů.

Postupně tak celou soustavu rovnic transformujeme na soustavy lineárních algebraických rovnic tvaru

$$\begin{aligned} & \sum_{s \in J_w} W_s(s_{ijkl} w_{kl}^s, w_{ij}^r)_{e(s)} + \sum_{s \in I_b} V_s(g_{nij}^s v_n^s, w_{ij}^r)_{e(s)} + \\ & + \sum_{s \in J_u} U_s\left(\varpi_i^s, \frac{\partial w_{ij}^r}{\partial x_j}\right)_{e(s)} - \sum_{s \in J_h} \Lambda_s \langle \nu_i^s, w_{ij}^r \cdot n_j \rangle_{h(s)} = \\ & = \langle u_{iD}, w_{ij}^r \cdot n_j \rangle_{\Gamma_{DM}}, \quad \forall r \in J_w \end{aligned} \quad (7.20)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{s \in J_w} W_s(g_{nkl} w_{kl}^s, v_m^r)_{e(s)} - \sum_{s \in I_b} V_s(\beta_{nm} v_n^s, v_m^r)_{e(s)} + \\ & + \sum_{s \in I_e} \Phi_s\left(\phi^s, \frac{\partial v_m^r}{\partial x_m}\right)_{e_s} - \sum_{s \in I_h} \Psi_s \langle \mu^s, v_m^r \cdot n_m \rangle_{h_s} = \\ & = \langle \varphi_D, v_m^r \cdot n_m \rangle_{\Gamma_{DE}}, \quad \forall r \in I_b \end{aligned} \quad (7.21)$$

$$\sum_{s \in J_w} W_s\left(\frac{\partial w_{ij}^s}{\partial x_j}, \varpi_i^r\right)_{e(s)} = 0, \quad \forall r \in J_u \quad (7.22)$$

$$\sum_{s \in I_b} D_s\left(\frac{\partial v_j^s}{\partial x_j}, \phi^r\right)_{e_s} = (\varrho, \phi^r)_\Omega, \quad \forall r \in I_e \quad (7.23)$$

$$- \sum_{s \in J_w} W_s \langle w_{ij}^s \cdot n_j, \nu_i^r \rangle_{h(s)} = - \langle T_{iN}, \mu_i^r \rangle_{\Gamma_{NM}}, \quad \forall r \in J_h \quad (7.24)$$

$$\begin{aligned} - \sum_{r \in I_b} D_s \langle v_j^s \cdot n_j, \mu^r \rangle_{h_s} &= - \langle D_N^e, \mu^r \rangle_{\Gamma_{NE}} - \\ & - \langle \sigma, \mu^r \rangle_{\Gamma_{hE} - \Gamma_{NE}}, \quad \forall r \in I_{hE} \end{aligned} \quad (7.25)$$

Výslednou soustavu rovnic lze přepsat v přehlednějším maticovém tvaru

$$\begin{aligned}
\mathbb{F} \mathbf{W} + \mathbb{P} \mathbf{V} + \mathbb{G} \mathbf{U} + \mathbb{H} \mathbf{\Lambda} &= \mathbf{q}_4 \\
\mathbb{P}^T \mathbf{W} - \mathbb{A} \mathbf{V} - \mathbb{B} \mathbf{\Phi} - \mathbb{C} \mathbf{\Psi} &= -\mathbf{q}_1 \\
\mathbb{G}^T \mathbf{W} &= \mathbf{0} \\
- \mathbb{B}^T \mathbf{V} &= -\mathbf{q}_2 \\
\mathbb{H}^T \mathbf{W} &= \mathbf{q}_5 \\
- \mathbb{C}^T \mathbf{V} &= -\mathbf{q}_3
\end{aligned} \quad (7.26)$$

kde \mathbf{W} , \mathbf{V} , \mathbf{U} , $\mathbf{\Lambda}$, $\mathbf{\Phi}$, $\mathbf{\Psi}$ jsou vektory hledaných neznámých, \mathbb{A} , \mathbb{B} , \mathbb{C} , \mathbb{F} , \mathbb{G} , \mathbb{H} , \mathbb{P} jsou bloky matice soustavy a \mathbf{q}_1 , \mathbf{q}_2 , \mathbf{q}_3 , \mathbf{q}_4 , \mathbf{q}_5 jsou části vektoru pravé strany. Většina z jmenovaných součástí soustavy (vyjma bloku \mathbb{P}) byly podrobně uvedeny v kapitolách 5.4 a 6.4. Na tomto místě si tedy podrobněji všimneme pouze generování nenulových prvků bloku \mathbb{P} .

Blok \mathbb{P}

Blok \mathbb{P} má velikost $|J_w| \times |I_b|$ a obsahuje integrální členy tvaru

$$(g_{nij}v_n^s, w_{ij}^r)_e \quad (7.27)$$

Při vyčíslování jednotlivých nenulových členů bloku přejdeme od tenzorového vyjádření k maticovému

$$(g_{nij}v_n^s, w_{ij}^r)_e = (g_{nm}v_n^s, w_m^r)_e, \quad (7.28)$$

kde tenzor piezoelektrických koeficientů

$$g = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_{111} & g_{122} & 2g_{112} \\ g_{211} & g_{222} & 2g_{212} \end{pmatrix} \quad (7.29)$$

a báze funkce

$$v^s = \begin{pmatrix} kx + a \\ ky + b \end{pmatrix}, \quad w^r = \begin{pmatrix} \alpha_1 x + \alpha_2 y + \alpha_3 \\ \alpha_4 x + \alpha_5 y + \alpha_6 \\ \alpha_7 x + \alpha_8 y + \alpha_9 \end{pmatrix}. \quad (7.30)$$

Potom

$$(g_{nm}v_n^s, w_m^r)_e = \int_e \sum_{m=1}^3 \sum_{n=1}^2 g_{nm}v_n^s, w_m^r dx dy = \int_e G(x, y) dx dy \quad (7.31)$$

kde $G(x, y)$ je polynom druhého stupně tvaru uvedeného v (6.38), jehož koeficienty vypočítáme následujícím způsobem

$$\begin{aligned} g_0 = & g_{11}a\alpha_3 + g_{12}a\alpha_6 + g_{13}a\alpha_9 + \\ & + g_{21}b\alpha_3 + g_{22}b\alpha_6 + g_{23}b\alpha_9 \end{aligned} \quad (7.32)$$

$$\begin{aligned} g_1 = & g_{11}(k\alpha_3 + a\alpha_1) + g_{12}(k\alpha_6 + a\alpha_4) + g_{13}(k\alpha_9 + a\alpha_7) + \\ & + g_{21}b\alpha_1 + g_{22}b\alpha_4 + g_{23}b\alpha_7 \end{aligned} \quad (7.33)$$

$$\begin{aligned} g_2 = & g_{11}a\alpha_2 + g_{12}a\alpha_5 + g_{13}a\alpha_8 + \\ & + g_{22}(b\alpha_2 + k\alpha_3) + g_{22}(b\alpha_5 + k\alpha_6) + g_{23}(b\alpha_8 + k\alpha_9) \end{aligned} \quad (7.34)$$

$$g_3 = g_{11}k\alpha_1 + g_{12}k\alpha_4 + g_{13}k\alpha_7 \quad (7.35)$$

$$g_4 = g_{11}k\alpha_2 + g_{12}k\alpha_5 + g_{13}k\alpha_8 + g_{21}k\alpha_1 + g_{22}k\alpha_4 + g_{23}k\alpha_7 \quad (7.36)$$

$$g_5 = g_{21}k\alpha_2 + g_{22}k\alpha_5 + g_{23}k\alpha_8 \quad (7.37)$$

Výslednou hodnotu integrálu polynomu druhého stupně na trojúhelníkovém elementu vypočteme podle vztahu (5.63).

Blok \mathbb{P} má vnitřní blokovou strukturu, obsahuje subbloky nenulových prvků velikosti 6×3 diagonálně uspořádané v rámci bloku \mathbb{P} .

Část III

Implementace a testování navržených modelů

Kapitola 8

Počítačová implementace

V předcházejících kapitolách byly postupně formulovány tři modely. Obecné postupy výpočtu pro tyto modely jsou obdobné; odlišnosti jsou převážně v generování lokálních matic. V rámci implementační části práce bylo postupně vytvořeno několik programových modulů obsahujících nástroje (datové struktury, procedury, funkce) pro sestavení globální matice soustavy konkrétní úlohy. Tyto programové moduly mohou být snadno začleněny do počítačové aplikace implementující libovolný z navržených modelů.

V rámci této kapitoly je ve stručnosti uvedena problematika počítačová implementace formulovaných modelů. Důraz je kladen především na popis celkové struktury algoritmu výpočtu, popis používaných datových struktur a významnějších algoritmů implementovaných v rámci práce. V závěru kapitoly jsou stručně popsány formáty používaných souborů.

Pro účely ladění a testování modelů byl vyvinut ucelený počítačový program umožňující interaktivní volbu sítě, zadání parametrů výpočtu (materiálové tenzory, okrajové podmínky, orientaci jednotlivých feroelektrických domén), generování globální matice, spuštění výpočtu, načtení výsledků a generování souborů pro následnou vizualizaci výsledků. Uvedená aplikace není přímým cílem práce a je chápána jako podpůrný prostředek pro ověření formulovaných postupů. Z tohoto důvodu není popis problematiky počítačové implementace vázán přímo na tento konkrétní program.

8.1 Základní datové struktury

Základními stavebními kameny celého modelu jsou datové struktury. Mezi nejdůležitější patří zejména:

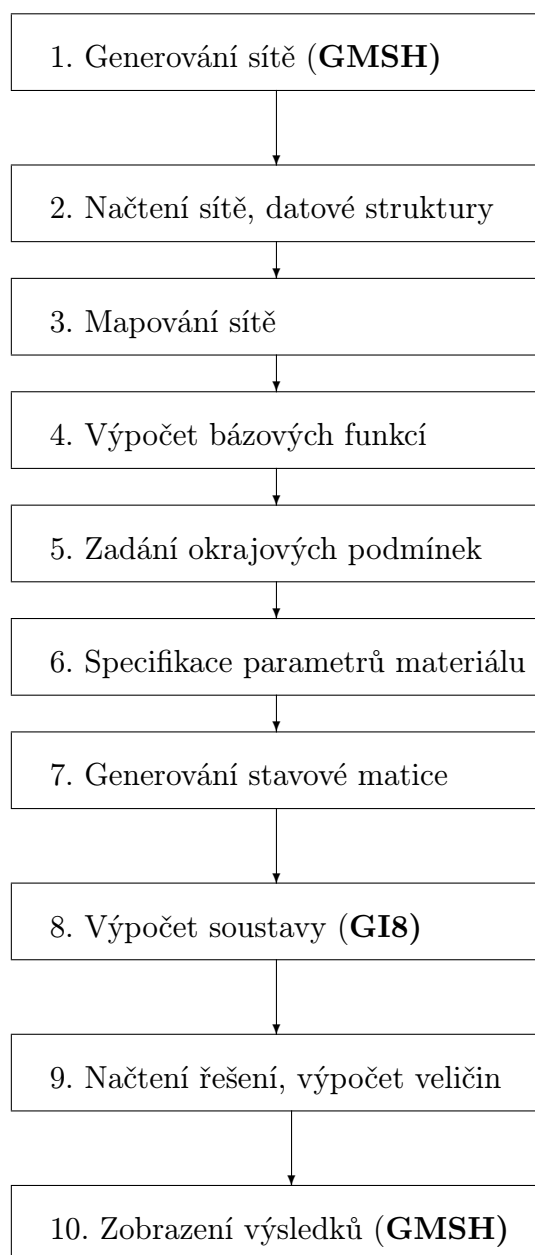
- Datová struktura – *materiál* – uchovává informace o fyzikálních vlastnostech modelovaného materiálu tj. hodnoty jednotlivých materiálových tenzorů, hodnotu spontánní polarizace a hodnotu koercitivního pole.
- Datová struktura – *doména* – uchovává informace o jedné feroelektrické doméně, tj. odkaz na příslušný materiál, orientaci spontánní polarizace

(úhel otočení spontánní polarizace od základního směru tj. kladného směru osy y). V rámci struktury jsou uchovány rovněž přepočtené hodnoty materiálových tenzorů.

- Datová struktura – *uzel* – uchovává obraz jediného uzlu sítě v paměti počítače, obsahuje především souřadnice uzlu sítě a dále informace zaznamenané pro účely efektivního vyhodnocení sousednosti elementů (indexy elementů, pro které je daný uzel vrcholem apod.).
- Datová struktura – *element* – obsahuje informace příslušející jednomu elementu sítě. Jedná se především o indexy uzlů tvořících vrcholy elementů, indexy stěn tvořících hranici elementu a odkaz na příslušnou doménu, do které element náleží. Ve struktuře jsou dále uchovány koeficienty vektorových a tenzorových bázevých funkcí, pomocné informace jako jsou plocha elementu a souřadnice těžiště a rovněž výsledky obdržené výpočtem vztahující se k danému elementu.
- Datová struktura – *stěna* – obsahuje informace příslušející jedné stěně sítě. Uchovává odkazy na uzly stěny, index elementu, kterému stěna náleží, index do seznamu stěn zaznamenávající sousednost a indexy řádků globální matice přidělených dané stěně. Dále jsou zde uchovány informace o typu stěny (vnější, vnitřní), pro vnější stěnu pak index do seznamu okrajových podmínek a dále pomocné informace jako střed, normálový vektor a délka. Struktura rovněž obsahuje datové položky pro uložení výsledků výpočtu souvisejících s danou stěnou.
- Datová struktura – *okrajová podmínka* – uchovává informace o typu a hodnotě okrajové podmínky.
- Datová struktura – *síť* – obsahuje základní geometrické parametry sítě, dále seznam všech uzlů, elementů, stěn, materiálů, domén a okrajových podmínek sítě a rovněž datové položky pro uchování informací o počtu vnitřních, vnějších a všech nedirichletovských hran a informace o velikosti stavové matice a počtu jejích nenulových prvků.

8.2 Struktura a datové toky výpočtu

Výpočet konkrétní úlohy předpokládá vykonání několika postupných kroků. Ty jsou prováděny buď prostřednictvím externího programu nebo v rámci programového modulu implementujícího příslušný model, přičemž data mezi jednotlivými kroky zpracování jsou předávána prostřednictvím diskových souborů, nebo přímo v interních datových strukturách. Posloupnost jednotlivých kroků je schematicky znázorněna na obrázku 8.1.



Obrázek 8.1: Algoritmus výpočtu

Generování sítě

Sítě používané pro účely testování modelů byly generovány pomocí programu GMSH, což je volně šiřitelný program. Program GMSH dovoluje zadávání geometrie vzorku, provedení triangulace zadané oblasti s různými parametry. Tento program rovněž umožňuje snadnou vizualizaci sítě a vizualizaci skalárních, vektorových i tenzorových veličin v rámci 2D popřípadě 3D oblasti. Základní geometrie vzorku jsou tímto programem standardně ukládány do souborů s příponou GEO, generované sítě potom do souborů s příponou MSH.

Načtení sítě

Základním krokem programu implementujícího vlastní model je načtení souboru sítě (předpokládá se uložení sítě v souboru s příponou MSH formátu používaném programem GMSH). Zároveň s načítáním a po něm jsou postupně naplňovány odpovídající datové struktury.

Mapování sítě

V modelu založeném na smíšené hybridní formulaci je třeba znát topologii sítě (sousednost elementů). Vzhledem k tomu, že soubory vytvořené používaným generátorem sítě, informaci o sousednosti elementů neposkytují, je třeba ji stanovit po načtení sítě před generováním globální matice. V rámci mapování sítě je kromě stanovení sousednosti elementů prováděno i mapování hran sítě tj. jednotlivým hranám jsou přiřazeny indexy řádků stavové matice.

Výpočet bázových funkcí

V rámci tohoto kroku jsou generovány koeficienty bázových vektorových a tenzorových funkcí pro jednotlivé elementy sítě.

Specifikace vlastností materiálu

Pro specifikaci dielektrických, piezoelektrických a elastických vlastností materiálu je třeba zadat jednotlivé materiálové tenzory. Minimální jednotkou konstantních materiálových tenzorů je jeden element sítě.

Specifikace okrajových podmínek

Okrajové podmínky zadávané pro výpočet úlohy odráží vnější elektrické a mechanické zatížení. Okrajové podmínky je nutno zadat pro všechny vnější hrany sítě a jsou zadávány typem (Dirichletova, Neumanova) a hodnotou. Změna okrajových podmínek má obecně vliv na množinu nedorichletovských hran sítě. Po změně okrajových podmínek je tedy zpravidla nutné provádět mapování vnějších hran sítě. Minimální jednotka pro zadání hodnoty okrajové podmínky je obecně jediná hrana.

Generování lokálních matic

Bloky matice odpovídající elektrické, mechanické a piezoelektrické části jsou generovány v souladu s postupy uvedenými v kapitolách 5, 6, 7. Hodnoty jednotlivých prvků lokálních matic jsou ovlivněny hodnotou koeficientů báзовých funkcí a hodnotami materiálových tenzorů.

Generování stavové matice soustavy

Při generování globální matice jsou vyčíslovány jednotlivé nenulové prvky globální matice včetně jejich umístění a postupně ukládány do textového souboru (standardně jsou generovány soubory s příponou SRO). Následně je vygenerován a do téhož souboru uložen i vektor pravé strany.

Výpočet řešení

Výpočet globální matice je prováděn externím řešičem s názvem GM6. Tento program vyvíjený na Ústavu informatiky Akademie věd ČR řeší zadanou soustavu lineárních rovnic metodou Shurrova komplementu (viz [21]). Program ukládá vektor výsledného řešení do souboru s názvem „Solution”.

Načtení a zpracování výsledků

Po ukončení výpočtu programem GM6 je vektor řešení uložen do souboru „Solution”. Načtený vektor buď přímo obsahuje hodnoty některých fyzikálních veličin (elektrický potenciál na elementech, elektrický potenciál na stěnách elementů, složky vektoru posunutí na elementech, složky vektoru posunutí na stěnách elementů), nebo je třeba příslušné fyzikální veličiny vypočítat jako lineární kombinaci několika hodnot získaných výpočtem (v případě vektoru elektrické indukce na elementu a tenzoru mechanického napětí na elementu). Následným výpočtem jsou získány hodnoty vektoru intenzity elektrického pole a tenzor mechanické deformace na jednotlivých elementech. Hodnoty jednotlivých fyzikálních veličin v modelované oblasti jsou standardně ukládány do diskových souborů s příponou POS pro účely jejich možné vizualizace programem GMSH.

Zobrazení výsledků

Hodnoty fyzikálních veličin uložených do diskových souborů s příponou POS jsou zobrazovány pomocí externího programu GMSH.

8.3 Původní algoritmy

Většina algoritmů implementovaných při počítačové realizaci modelů byla popsána v kapitolách věnujících se aplikaci metody konečných prvků – jedná se o algoritmy generování báзовých funkcí, generování lokálních matic a generování

globální matice. V této kapitole jsou uvedeny další algoritmy, které nebyly doposud popsány a které mají zásadní postavení v rámci implementovaných modelů.

8.3.1 Mapování sítě

Mapování sítě je jedním ze stěžejních algoritmů přípravné fáze výpočtu. Algoritmus probíhá v následujících krocích:

1. Vytvoření seznamu všech stěn sítě. Každé stěně je jednoznačně přidělen index řádku stěny.
2. Zjištění sousednosti elementů (bližší popis algoritmu tohoto kroku viz dále).
3. Vytvoření seznamu okrajových podmínek.
4. Mapování hran sítě. Každé hraně sítě je jednoznačně přidělen index řádku stavové matice.
5. Generování báзовých vektorových a tenzorových funkcí na jednotlivých elementech.

8.3.2 Sousednost elementů

Důležitým předpokladem realizace smíšených hybridních modelů je znalost topologie sítě tj. informace o tom, které elementy spolu navzájem sousedí. Tuto topologii je třeba stanovit po načtení sítě.

Jedním ze základních algoritmů (značně neefektivní, uváděný z referenčních důvodů) nazvaný *Sousednost I* je algoritmus, který stěny každého elementu porovnává se stěnami všech zbývajících elementů.

Algoritmus: Sousednost I

1. Proměnné i přiřaď hodnotu 1.
2. Pokud hodnota i je větší než počet elementů, algoritmus ukonči, v opačném případě vezmi ze seznamu elementů element s indexem i a označ jej e_i .
3. Pro každou stěnu f_j , $j = 1, 2, 3$ elementu e_i proveď:
 - (a) Nemá-li stěna f_j doposud určenou sousední stěnu, projdi postupně každou stěnu h všech elementů v seznamu elementů od indexu $i + 1$.
 - (b) Nemá-li stěna h doposud určenou sousední stěnu a souhlasí-li uzly stěny f_j s uzly stěny h , jsou stěny f_j a h stěnami sousedními – zaznamenej sousednost.
4. Zvětši hodnotu proměnné i o 1 a přejdi ke kroku 2.

Algoritmus *Sousednost I* je zejména pro rozsáhlejší sítě značně časově náročný. Počet porovnání nutných pro stanovení topologie sítě roste při použití tohoto algoritmu s druhou mocninou počtu elementů.

Cílem efektivního algoritmu je pokud možno eliminovat nadbytečné prohledávání sítě. Při vytváření obrazu sítě v datové paměti jsou vytvářeny struktury náležející uzlům a elementům sítě. V rámci každé struktury uzlu je možno zaznamenat indexy do seznamu elementů, pro které je daný uzel vrcholem. Sousední stěny je potom možno hledat pouze v rámci elementů, které mají společný uzel. Uvedený postup využívá algoritmus nazvaný *Sousednost II*.

Algoritmus: Sousednost II

1. Proměnné i přiřadit hodnotu 1.
2. Pokud hodnota i je větší než počet uzlů, algoritmus ukončí, v opačném případě vezmi ze seznamu uzlů uzel s indexem i a označ jej u_i . Počet elementů uzlu u_i označ n .
3. Pro každý element e_j , ($j = 1, \dots, n$) uzlu u_i proved':
 - (a) Pro každou stěnu f_k , $k = 1, 2, 3$ elementu e_j proved':
 - i. Nemá-li stěna f_k doposud určenou sousední stěnu, projdi postupně každou stěnu h všech elementů e_{j+1}, \dots, e_n uzlu u_i .
 - ii. Nemá-li stěna h doposud určenou sousední stěnu a souhlasí-li uzly stěny f_k s uzly stěny h , jsou stěny f_k a h stěnami sousedními – zaznamenej sousednost.
4. Zvětši hodnotu proměnné i o 1 a přejdi ke kroku 2.

Počet porovnání nutných pro stanovení topologie sítě roste při použití algoritmu *Sousednost II* s násobkem počtu uzlů sítě a je závislý na počtu elementů jednotlivých uzlů (počet elementů, pro které je daný uzel vrcholem).

Zefektivnění výpočtu oproti algoritmu *Sousednost II* je možno získat uchováváním další dodatečné informace v rámci uzlu a to informace o pořadí uzlu v elementu, pro který je daný uzel vrcholem.

Nechť uzel u je součástí elementu e a v rámci tohoto elementu se uzel u vyskytuje na k -té pozici. Při testování stěn, kterých je uzel u součástí, elementu e má potom smysl zkoumat pouze dvě stěny dané dvojicí uzlů s indexy $(k-1, k)$ a $(k, k+1)$. Navíc, vzhledem k jednotné orientaci všech elementů (uzly jsou uchovávány v pravotočivém smyslu), testujeme-li stěnu elementu e tvořenou dvojicí uzlů s indexy $(k-1, k)$ proti stěnám elementu e_2 (v rámci kterého je uzel u l -tý v pořadí), má smysl testovat pouze stěnu s indexy uzlů $(l, l+1)$ a naopak. Tento přístup využívá algoritmus nazvaný *Sousednost III*.

Algoritmus: Sousednost III

1. Proměnné i přiřaď hodnotu 1.
2. Pokud hodnota i je větší než počet uzlů, algoritmus ukonči, v opačném případě vezmi ze seznamu uzlů uzel s indexem i a označ jej u_i . Počet elementů uzlu u_i označ n .
3. Pro každý element e_j , ($j = 1, \dots, n$) uzlu u_i proveď:
 - (a) Symbolem k označ pořadí uzlu u_i v rámci elementu e_j .
 - (b) Symbolem f označ stěnu tvořenou uzly s indexy $k, k + 1$ v rámci elementu e_j a proveď:
 - i. Nemá-li stěna f doposud určenou sousední stěnu, projdi postupně všechny elementy e_r , $r = j + 1, \dots, n$ uzlu u_i .
 - ii. Symbolem l označ pořadí uzlu u_i v rámci elementu e_r .
 - iii. Symbolem h označ stěnu tvořenou uzly s indexy $l, l - 1$ v rámci elementu e_r .
 - iv. Nemá-li stěna h doposud určenou sousední stěnu a souhlasí-li uzly stěny f s uzly stěny h , jsou stěny f a h stěnami sousedními – zaznamenej sousednost.
 - (c) Symbolem f označ stěnu tvořenou uzly s indexy $k, k - 1$ v rámci elementu e_j a proveď:
 - i. Nemá-li stěna f doposud určenou sousední stěnu, projdi postupně všechny elementy e_r , $r = j + 1, \dots, n$ uzlu u_i .
 - ii. Symbolem l označ pořadí uzlu u_i v rámci elementu e_r .
 - iii. Symbolem h označ stěnu tvořenou uzly s indexy $l, l + 1$ v rámci elementu e_r .
 - iv. Nemá-li stěna h doposud určenou sousední stěnu a souhlasí-li uzly stěny f s uzly stěny h , jsou stěny f a h stěnami sousedními – zaznamenej sousednost.
4. Zvětši hodnotu proměnné i o 1 a přejdi ke kroku 2.

Algoritmus *Sousednost III* redukuje počet testování stěn oproti algoritmu *Sousednost II* zhruba na polovinu.

V rámci kroku mapování sítě jsou vytvářeny datové struktury jednotlivých stěn. Pro jednotlivé uzly je možno zaznamenat informaci o tom, kterých stěn je daný uzel součástí. Při určování sousednosti je možné procházet jednotlivé uzly a vzájemně porovnávat pouze stěny aktuálního uzlu. Tohoto přístupu využívá algoritmus nazvaný *Sousednost IV*.

Algoritmus: Sousednost IV

1. Proměnné i přiřaď hodnotu 1.
2. Pokud hodnota i je větší než počet uzlů, algoritmus ukonči, v opačném případě vezmi ze seznamu uzlů uzel s indexem i a označ jej u_i . Počet stěn uzlu u_i označ n .
3. Pro každou stěnu f_j , ($j = 1, \dots, n$) uzlu u_i proveď:
 - (a) Nemá-li stěna f_j doposud určenou stěnu sousední, projdi postupně stěny f_k , ($k = j + 1, \dots, n$) uzlu u_i .
 - (b) Nemá-li stěna f_k doposud určenou stěnu sousední a souhlasí-li uzly stěny f_k s uzly stěny f_j , jsou stěny f_k a f_j stěnami sousedními – zaznamej sousednost.
4. Zvětši hodnotu proměnné i o 1 a přejdi ke kroku 2.

Maximální počet vzájemného testování stěn roste lineárně s násobkem počtu uzlů sítě a je ovlivněn hodnotou kardinality uzlů.

8.3.3 Mapování hran

V rámci algoritmu mapování hran je každé nedorichletovské hraně (vnitřní hrany odpovídají dvěma sousedním stěnám, vnější hrany odpovídají pouze jediné stěně sítě) přiděleno jednoznačně číslo řádku stavové matice. Mapování vnitřních hran je prováděno jednorázově po načtení sítě a vytvoření potřebných datových struktur. Naopak mapování vnějších hran musí být zpravidla provedeno opakovaně před vlastním generováním matice, neboť seznam vnějších nedorichletovských hran je obecně závislý na zadání okrajových podmínek.

8.4 Formáty vstupních a výstupních souborů

Soubory sítě

Model byl naprogramován tak, aby dokázal načítat soubory sítí generované programem GMSH. V souboru sítě je uložen výčet jednotlivých uzlů a elementů v následujícím formátu:

- Na prvním řádku souboru je klíčové slovo \$NOD uvozující počátek zadávání uzlů.
- Na druhém řádku souboru je celé číslo n udávající počet uzlů sítě.
- Na každém z n dalších řádků jsou uvedeny: celočíselná hodnota i představující číslo uzlu a následně tři reálné hodnoty udávající souřadnice uzlu.

- Na dalším řádku je uvedeno klíčové slovo \$ENDNOD uvozující konec zadávání uzlů.
- Na dalším řádku je uvedeno klíčové slovo \$ELM uvozující počátek zadávání elementů.
- Na dalším řádku souboru je celé číslo m udávající počet elementů sítě.
- Na každém z m dalších řádků jsou uvedeny parametry jediného elementu: číslo elementu, číslo entity, počet vrcholů a seznam indexů uzlů tvořících vrcholy elementu.
- Na dalším řádku je uvedeno klíčové slovo \$ENDELM uvozující počátek zadávání elementů.

Soubory globální matice

Přípustné formáty souboru globální matice jsou specifikovány programem používaným pro řešení matice. V rámci implementovaného modelu jsou generována globální matice a příslušný vektor pravé strany ukládány do jediného textového souboru následujícího formátu:

- Na prvním řádku souboru je uvedeno celé číslo n , které představuje rozměr generované matice.
- Na druhém řádku souboru je celé číslo m udávající počet nenulových prvků horní trojúhelníkové části globální matice (generovaná matice je symetrická, je tedy generována pouze její horní trojúhelníková část).
- Na každém z m dalších řádků souboru jsou vždy dvě celočíselné hodnoty i, j a reálné číslo a_{ij} , které udávají pozici a hodnotu nenulového prvku matice.
- Na dalších n řádcích souboru je zaznamenán vektor pravé strany (na každém řádku jedna hodnota).

Soubory řešení

Program GM6 používaný pro řešení matice ukládá výsledky výpočtu do textového souboru, jehož počet řádků odpovídá rozměru matice. Na každém řádku je uvedena jediná hodnota vypočteného vektoru řešení.

Soubory výsledků

Rozložení jednotlivých fyzikálních veličin v rámci modelované oblasti bylo zobrazováno převážně pomocí programu GMSH. Tento program nabízí vizualizaci skalárních, vektorových i tenzorových veličin obecně ve 3D prostoru. Údaje potřebné pro vykreslení příslušné veličiny jsou očekávány v textových souborech ve formátu *.pos.

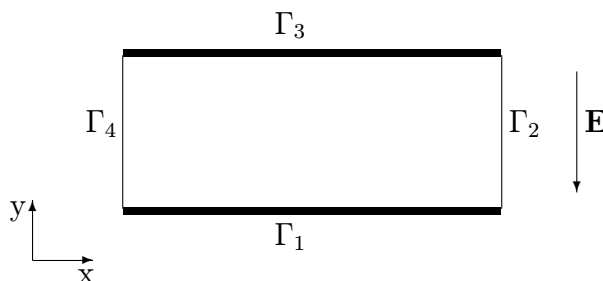
Kapitola 9

Testování navržených modelů

Cílem této kapitoly je dokumentovat výsledky modelů získané simulací základních úloh a porovnání těchto výsledků s analytickým řešením. Cíleně jsou voleny právě úlohy, pro které je možný přibližný odhad řešení. Materiálové tenzory použité pro základní testování modelů jsou voleny s ohledem na názornost a svými hodnotami nereflktují přímo konkrétní materiály. Jednotlivé fyzikální veličiny v těchto úlohách jsou uváděny bez příslušných jednotek. V závěru kapitoly je potom uveden příklad výpočtu konkrétních feroelektrické struktury.

9.1 Testování modelu elektrického pole

Pro základní testování modelu elektrického pole je předpokládán vzorek dielektrického materiálu obdélníkového tvaru velikosti 10×4 potažený v dolní a horní části kovovými elektrodami. Praktickým příkladem uvedené struktury může být například běžný dielektrický kondenzátor. Prostřednictvím elektrod je materiál vystaven elektrickému působení. Hranice vzorku je rozdělena na čtyři části (dolní, pravá, horní, levá) označených postupně Γ_1 , Γ_2 , Γ_3 , Γ_4 . Struktura modelovaného vzorku je uvedena na obrázku 9.1



Obrázek 9.1: Struktura modelovaného vzorku

Základní podmínkou výpočtu konkrétní úlohy je pokrytí modelované oblasti sítí trojúhelníkových elementů. Pro výpočty byly užívány paralelně dvě sítě a to strukturovaná síť *Mesh1* a nestrukturovaná *Mesh2* vyobrazené na obrázku 9.2.



Obrázek 9.2: Sítě používané pro výpočet testovacích úloh; strukturovaná síť *Mesh1* (vlevo) a nestrukturovaná *Mesh2* (vpravo).

Použité sítě jsou velmi hrubé (síť *Mesh1* má 80 a *Mesh2* 74 elementů), zpravidla nedostatečné pro praktické účely, ovšem na druhé straně ilustrativní a vhodné pro demonstraci výsledků.

Dále jsou uvedeny zadání a výsledky čtyř výpočtů provedených pro daný vzorek pro různé hodnoty tenzoru dielektrických koeficientů (získané rotací základního tenzoru). U jednotlivých testů jsou vždy uvedeny materiálové vlastnosti, okrajové podmínky zadávané pro jednotlivé části hranice vzorku, analytický výpočet a vybrané výsledky získané výpočtem modelu.

Elektrické pole homogenního ortotropního materiálu

Základní úlohou modelování elektrických polí je výpočet elektrického pole v materiálu s tenzorem dielektrických koeficientů obsahujícím pouze diagonální prvky, kdy směr vnějšího elektrického pole je rovnoběžný s jednou z os soustavy souřadné. Materiálové vlastnosti a okrajové podmínky zadávané při výpočtu testovacích úloh *Test1*, *Test2* jsou uvedeny v tabulce 9.1. Rozdíly obou testů odpovídají rotaci tenzoru a tedy i materiálu o 90° .

	<i>Test1</i>	<i>Test2</i>
Tenzor dielektrických koeficientů ε	$\begin{pmatrix} 10 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 10 \end{pmatrix}$
Podmínka na Γ_1	$\varphi = 0$	$\varphi = 0$
Podmínka na Γ_2	$\mathbf{D} \cdot \mathbf{n} = 0$	$\mathbf{D} \cdot \mathbf{n} = 0$
Podmínka na Γ_3	$\varphi = 20$	$\varphi = 20$
Podmínka na Γ_4	$\mathbf{D} \cdot \mathbf{n} = 0$	$\mathbf{D} \cdot \mathbf{n} = 0$

Tabulka 9.1: Parametry zadane pro úlohy *Test1* a *Test2*

Vzhledem k homogenitě materiálu musí být homogenní i výsledné elektrické pole uvnitř materiálu. Předpokádaná hodnota vektoru intenzity elektrického pole hodnota je

$$\mathbf{E} = (E_x, E_y) = (0, -5) . \quad (9.1)$$

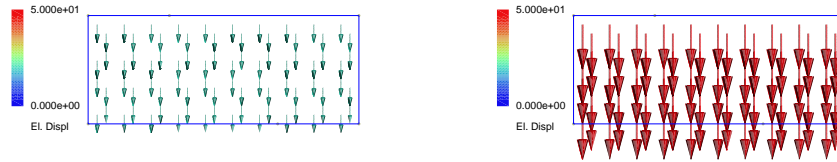
Potom hodnota vektoru elektrické indukce uvnitř materiálu je pro *Test1*

$$\mathbf{D} = (D_x, D_y) = \varepsilon \mathbf{E} = (0, -5\varepsilon_{22}) = (0, -20) . \quad (9.2)$$

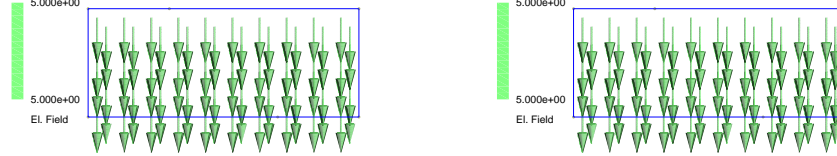
Test2 se liší pouze hodnotou efektivní dielektrické konstanty. Výsledná elektrická indukce by měla mít stejný směr, ovšem jinou hodnotu

$$\mathbf{D} = (D_x, D_y) = \varepsilon \mathbf{E} = (0, -5\varepsilon_{22}) = (0, -50) . \quad (9.3)$$

Rozložení vektorů elektrické indukce a intenzity elektrického pole v rámci uvažovaného vzorku získaných výpočtem pro oba testy *Test1*, *Test2* s použitím sítě *Mesh1* je prezentováno na obrázcích 9.3, 9.4. Výsledné elektrické pole a číselné hodnoty jednotlivých veličin plně odpovídají hodnotám předpokládaným na základě analytického výpočtu.



Obrázek 9.3: Rozložení elektrické indukce v modelovaného vzorku pro úlohy *Test1* (vlevo) a *Test2* (vpravo).



Obrázek 9.4: Rozložení intenzity elektrického pole v modelovaném vzorku pro úlohy *Test1* (vlevo) a *Test2* (vpravo).

Elektrické pole homogenního anizotropního materiálu

Uvažujme případ, kdy tenzor dielektrických koeficientů obsahuje kromě diagonálních prvků rovněž nenulové prvky mimo hlavní diagonálu. Vnější elektrickým polem dochází k indukci elektrického náboje, přičemž směr vektoru elektrické indukce je obecně různý od směru vektoru intenzity elektrického pole. V tabulce 9.2 jsou uvedeny parametry dalších dvou testovacích úloh *Test3* a *Test4*.

Zadávané materiálové parametry pro oba testy (*Test3*, *Test4*) jsou totožné. Obě úlohy se navzájem liší v zadání Neumanovy okrajové podmínky. V úloze *Test3* je na levé i pravé straně vzorku přiřazena homogenní Neumanova okrajová podmínka. Takováto konfigurace odpovídá případu, kdy je indukovaný náboj na okraji vzorku v ustáleném stavu eliminován například volným nábojem okolního prostředí. V úloze *Test4* je naopak zadávána Neumanova okrajová podmínka odpovídající analyticky vypočtenému vektoru elektrické indukce uvnitř materiálu.

	Test 3	Test 4
Tenzor dielektrických koeficientů ε	$\begin{pmatrix} 7 & 3 \\ 3 & 7 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 7 & 3 \\ 3 & 7 \end{pmatrix}$
Podmínka na Γ_1	$\varphi = 0$	$\varphi = 0$
Podmínka na Γ_2	$\mathbf{D} \cdot \mathbf{n} = 0$	$\mathbf{D} \cdot \mathbf{n} = -15$
Podmínka na Γ_3	$\varphi = 20$	$\varphi = 20$
Podmínka na Γ_4	$\mathbf{D} \cdot \mathbf{n} = 0$	$\mathbf{D} \cdot \mathbf{n} = 15$

Tabulka 9.2: Parametry zadane pro testovací výpočty *Test3* a *Test4*

Konfigurace odráží případ, kdy modelujeme například pouze střední část širší oblasti.

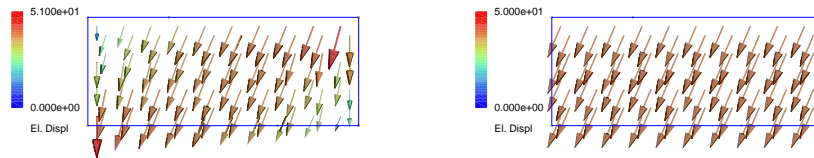
Hodnota výsledného elektrického pole v případě obou testů by měla odpovídat hodnotě vyčíslené pro úlohy *Test1* a *Test*.

$$\mathbf{E} = (E_x, E_y) = (0, -5) \quad (9.4)$$

Hodnota elektrické indukce ve střední části vzorku by v obou testech, vzhledem ke stejným materiálovým parametrům, měla nabývat stejné hodnoty

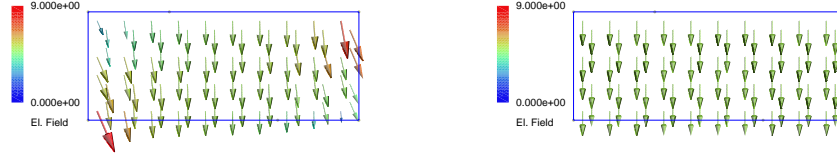
$$\mathbf{D} = (D_x, D_y) = \varepsilon \mathbf{E} = (0, -5\varepsilon_{22}) = (-15, -35) \quad (9.5)$$

Vlivem homogenní Neumanovy podmínky zadávané v úloze *Test3* lze ve výsledcích tohoto testu očekávat ovlivnění vektoru elektrické indukce na levém a pravém okraji vzorku (vektor elektrické indukce by zde měl být v souladu s okrajovou podmínkou rovnoběžný s okrajem vzorku).



Obrázek 9.5: Rozložení elektrické indukce v modelovaném vzorku pro úlohy *Test3* (vlevo) a *Test4* (vpravo).

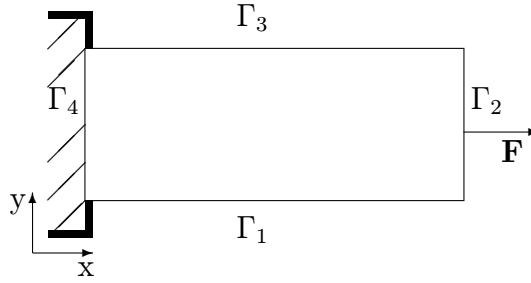
Rozložení vektorů elektrické indukce v modelované oblasti pro oba testy *Test3*, *Test4* na síti *Mesh1* je zřejmé z obrázku 9.5. Je zde patrná vzájemná shoda vektorů indukce ve střední části vzorku – jejich hodnota je $(-15, -35)$ a souhlasí s hodnotou získanou na základě analytického rozboru. Vypočtená intenzita elektrického pole (viz obrázek 9.6) v úloze *Test3* stejně jako u vektorů elektrické indukce vykazuje na levém a pravém okraji ovlivnění zadanou okrajovou podmínkou, pro *Test4* je potom stejně jako elektrická indukce homogenní v celé modelované oblasti.



Obrázek 9.6: Rozložení intenzity elektrického pole v modelovaném vzorku pro úlohy *Test3* (vlevo) a *Test4* (vpravo).

9.2 Testování modelu elastického pole

Předpokládáme vzorek elastického materiálu obdélníkového tvaru velikosti 10×4 pevně uchycený na levém okraji. Hranice vzorku je rozdělena na čtyři části (dolní, pravá, horní, levá) označených postupně Γ_1 , Γ_2 , Γ_3 , Γ_4 . Struktura modelovaného vzorku je uvedena na obrázku 9.7. Konfigurace vzorku odpovídá vetknutému nosníku, který je namáhán prostým tahem.



Obrázek 9.7: Struktura modelovaného vzorku

Pro konfiguraci vzorku dle obrázku 9.7 budou uvedeny výsledky dvou testů, které se liší zadávaným tenzorem materiálových vlastností. V tabulce 9.3 jsou uvedeny parametry těchto dvou testovacích úloh.

	Test 5	Test 6
Tenzor elastických koeficientů \mathbf{s}	$\begin{pmatrix} 7 & 0 & 0 \\ 0 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 12 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 7 & -3 & 0 \\ -3 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 12 \end{pmatrix}$
Podmínka na Γ_1	$\mathbf{T} \cdot \mathbf{n} = (0, 0)$	$\mathbf{T} \cdot \mathbf{n} = (0, 0)$
Podmínka na Γ_2	$\mathbf{T} \cdot \mathbf{n} = (100, 0)$	$\mathbf{T} \cdot \mathbf{n} = (100, 0)$
Podmínka na Γ_3	$\mathbf{T} \cdot \mathbf{n} = (0, 0)$	$\mathbf{T} \cdot \mathbf{n} = (0, 0)$
Podmínka na Γ_4	$\mathbf{u} = (0, 0)$	$\mathbf{u} = (0, 0)$

Tabulka 9.3: Parametry zadané pro testovací výpočty *Test5* a *Test6*.

Uvažujme nejprve úlohu *Test5*. Vzorek je pevně uchycen na levém okraji a na jeho pravém okraji působí tažná síla (v kladném směru osy x). Tenzor elastických

koeficientů vyjádřený v maticovém tvaru má nenulové pouze diagonální složky. Z analýzy této úlohy je zřejmé že výsledné mechanické napětí v daném vzorku materiálu by mělo mít nenulovou pouze složku T_{xx} a tato složka by měla nabývat hodnoty

$$T_{xx} = 100$$

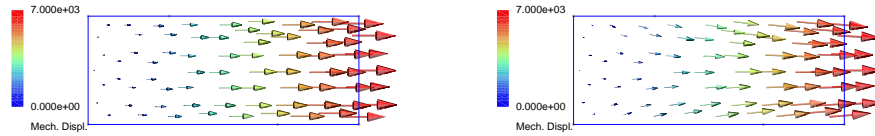
v souladu se zadanou Neumanovou okrajovou podmínkou na levém okraji. Potom jednotlivé složky mechanické deformace vzhledem k tenzoru elastických koeficientů jsou rovny

$$S_{xx} = s_{11}T_{xx} = 700, \quad S_{yy} = 0, \quad S_{xy} = 0.$$

Výsledkem působení síly na daný vzorek je potom mechanické posunutí ve směru osy x v bodě (x, y) rovné $u_x = xS_{xx}$. Výsledné posunutí na pravém okraji vzorku ve směru osy x je 7000.

Výsledky testovací úlohy *Test6* budou mírně odlišné. Tenzor elastických koeficientů zadávaný při výpočtu této úlohy má nenulovou diagonální složku, která vyjadřuje příspěvek k deformaci ve směru osy y , působí-li síla ve směru osy x . Vzhledem k Neumanově okrajové podmínce zadané pro pravý okraj vzorku vyvolá působící síla mechanické napětí $T_{xx} = 100$. Tuto hodnotu lze očekávat na volných koncích vzorku. Naopak na jeho levém okraji, vzhledem k pevnému uchycení, je možné očekávat nenulovost i ostatních složek mechanického napětí. V pravém horním a v levém dolním rohu vzorku předpokládaná hodnota mechanického posunutí

$$\mathbf{u}(10, 0) = (600, 7000), \quad \mathbf{u}(10, 4) = (-600, 7000).$$

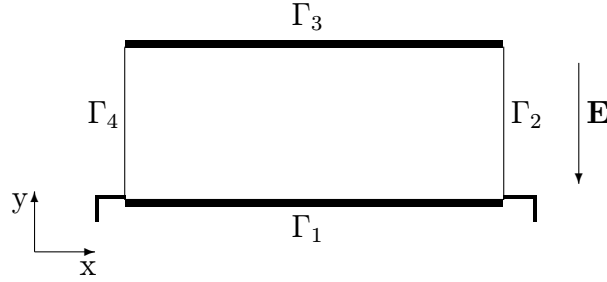


Obrázek 9.8: Rozložení vektorů mechanického posunutí v modelovaném vzorku pro úlohy *Test5* (vlevo) a *Test6* (vpravo).

Na obrázku 9.8 je uvedeno rozložení vektorů mechanického posunutí pro obě testovací úlohy *Test5* a *Test6*. Výsledky odpovídají očekávaným hodnotám jak po stránce kvalitativní, tak po stránce kvantitativní. Z výsledků testu *Test5* je patrné pouhé prodloužení vzorku. Vzorek z úlohy *Test6* vykazuje kromě prodloužení v x -ovém směru i kontrakci v y -ovém směru.

9.3 Testování modelu elektroelastického pole

V této části budou uvedeny úlohy pro vzorek piezoelektrického materiálu vystaveného vnějšímu elektrickému poli. Zaměříme se především na výsledné mechanické posunutí.



Obrázek 9.9: Struktura modelovaného vzorku.

Uvažujme vzorek piezoelektrického materiálu obdélníkového tvaru velikosti 10×4 potažený v dolní a horní části kovovými elektrodami s pevným mechanickým uchycením na dolním okraji. Prostřednictvím elektrod je materiál vystaven elektrickému působení. Hranice vzorku je rozdělena na čtyři části označených postupně Γ_1 , Γ_2 , Γ_3 , Γ_4 . Struktura modelovaného vzorku je uvedena na obrázku 9.9. V tabulce 9.4 jsou uvedeny parametry zadávané při výpočtu testovacích úloh *Test7* a *Test8*. Oba testy se navzájem liší směrem vnějšího elektrického pole.

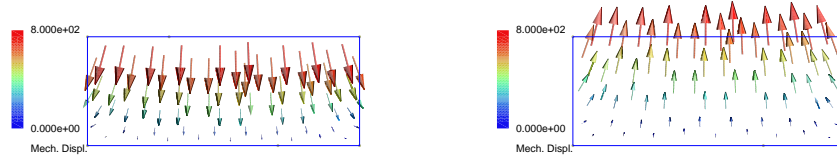
	Test 7	Test 8
Tenzor dielektrických koeficientů ε	$\begin{pmatrix} 10 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 10 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}$
Tenzor piezoelektrických koeficientů \mathbf{d}^T	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 100 \\ -20 & 50 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 100 \\ -20 & 50 & 0 \end{pmatrix}$
Tenzor elastických koeficientů \mathbf{s}	$\begin{pmatrix} 7 & -3 & 0 \\ -3 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 12 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 7 & -3 & 0 \\ -3 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 12 \end{pmatrix}$
Podmínky na Γ_1	$\varphi_D = 0$ $\mathbf{u} = (0, 0)$	$\varphi_D = 20$ $\mathbf{u} = (0, 0)$
Podmínky na Γ_2	$\mathbf{D} \cdot \mathbf{n} = 0$ $\mathbf{T} \cdot \mathbf{n} = (0, 0)$	$\mathbf{D} \cdot \mathbf{n} = 0$ $\mathbf{T} \cdot \mathbf{n} = (0, 0)$
Podmínky na Γ_3	$\varphi_D = 20$ $\mathbf{T} \cdot \mathbf{n} = (0, 0)$	$\varphi_D = 0$ $\mathbf{T} \cdot \mathbf{n} = (0, 0)$
Podmínky na Γ_4	$\mathbf{D} \cdot \mathbf{n} = 0$ $\mathbf{T} \cdot \mathbf{n} = (0, 0)$	$\mathbf{D} \cdot \mathbf{n} = 0$ $\mathbf{T} \cdot \mathbf{n} = (0, 0)$

Tabulka 9.4: Parametry zadané pro testovací výpočty *Test7* a *Test8*.

Uvažujme neprve parametry úlohy *Test7*. Působením vnějšího elektrického pole, jehož intenzita vzhledem k potenciálu na elektrodách a ke vzdálenosti elektrod je $\mathbf{E} = (E_x, E_y) = (0, -5)$, dochází mimo jiné k deformaci vzorku. Jednotlivé složky deformace je možné odhadnout na základě intenzity elektrického pole

$$S_{xx} = d_{12}E_y = 100, \quad S_{yy} = d_{22}E_y = -250, \quad S_{xy} = 0.$$

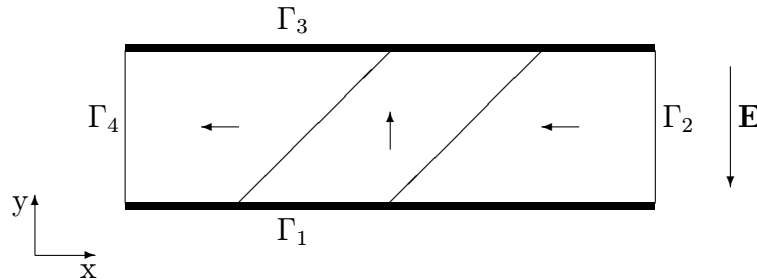
Ve výsledcích úlohy *Test7* lze tedy očekávat dilataci vzorku v x-ovém směru a kontrakci v y-ovém. Na základě obdobného rozboru provedeného pro úlohu *Test8* účinek vnějšího působení naopak vyvolá kontrakci vzorku v x-ovém a dilataci v y-ovém směru. Rozložení vektorů mechanického posunutí pro oba testy je uvedeno na obrázku 9.10.



Obrázek 9.10: Rozložení vektorů mechanického posunutí v modelovaném vzorku pro úlohy *Test7* (vlevo) a *Test8* (vpravo).

9.4 Výpočet elektrického pole ve feroelektrickém krystalu

V této kapitole bude demonstrováno použití modelu pro výpočet rozložení elektrického pole ve vícedoménovém feroelektrickém krystalu. Uvažujme vzorek feroelektrického materiálu obdélníkového tvaru velikosti $10 \times 2\text{mm}$ s vnitřní doménovou strukturou vyznačenou na obrázku 9.11. Vzorek je vystaven vnějšímu elektrickému působení. Materiálové parametry vzorku a okrajové podmínky za-



Obrázek 9.11: Struktura modelovaného feroelektrického vzorku

dávané pro výpočet úlohy jsou uvedeny v tabulce 9.5.

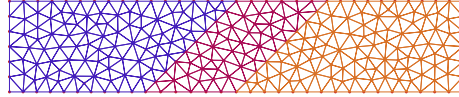
Tenzor relativních dielektrických koeficientů ε_r	$\begin{pmatrix} 4400 & 0 \\ 0 & 140 \end{pmatrix}$
Podmínka na Γ_1	$\varphi = 0$
Podmínka na Γ_2	$\mathbf{D} \cdot \mathbf{n} = 0$
Podmínka na Γ_3	$\varphi = 20V$
Podmínka na Γ_4	$\mathbf{D} \cdot \mathbf{n} = 0$

Tabulka 9.5: Materiálové parametry a okrajové podmínky úlohy

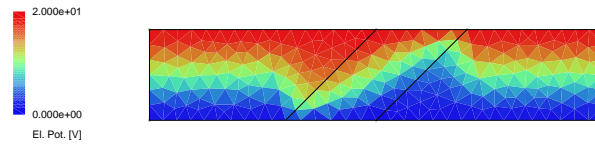
Obrázky 9.13, 9.14, 9.15 ukazují rozložení elektrického potenciálu, vektoru elektrické indukce a vektoru intenzity elektrického pole v modelovaném feroelektrickém vzorku. Vlivem doménových stěn dochází k nerovnoměrnému rozložení elektrického pole v oblasti vzorku.

Poznámka 9.1: Některé výsledky modelování feroelektrického dvoudoménového krystalu s 90° doménovou stěnou vystaveného vnějšímu elektrickému poli byly publikovány v [17] a [18].

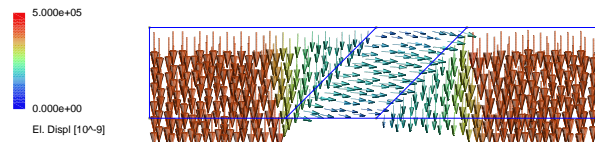
Poznámka 9.2: Při výpočtu soustav generovaných modelem elektroelastického pole pro materiály s výraznými piezoelektrickými vlastnostmi nastávají pro větší sítě problémy. Program řešice končí po určitém čase výpočet, aniž by poskytl výsledné řešení. Aktuálně je tento problém konzultován s autory používaného programu. Na základě testování byla přislíbena úprava řešice pro účely výpočtu soustav generovaných tímto modelem.



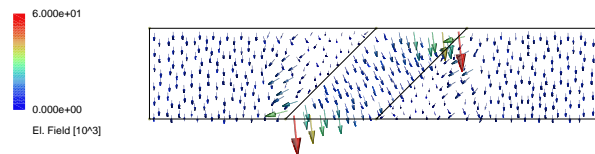
Obrázek 9.12: Rozklad modelované oblasti.



Obrázek 9.13: Rozložení elektrického potenciálu v modelovaném feroelektrickém vzorku.



Obrázek 9.14: Rozložení vektorů elektrické indukce v modelovaném feroelektrickém vzorku.



Obrázek 9.15: Rozložení vektorů intenzity elektrického pole v modelovaném feroelektrickém vzorku.

Kapitola 10

Závěr

Předložená práce řeší velmi důležitou problematiku modelování některých fyzikálních jevů charakteristických pro feroelektrické materiály.

V práci byly postupně formulovány tři modely. První model je zaměřen na simulaci elektrických veličin ve vzorku heterogenního anizotropního dielektrického materiálu vystaveném vlivu vnějšího elektrického pole. Druhý z navržených modelů řeší výpočet mechanických veličin ve vzorku heterogenního anizotropního elastického materiálu vystaveném působení vnějších mechanických sil. Třetí model potom propojuje oba předchozí a zároveň zohledňuje piezoelektrické vlastnosti, slouží k modelování elektroelastického pole ve vzorku feroelektrického materiálu s libovolnou vnitřní strukturou feroelektrických domén vystaveném vnějšímu elektrickému i mechanickému zatížení. Vzhledem k tomu, že modely jsou orientovány na fyzikální jevy tenkých vrstev, byly navrženy a implementovány ve dvoudimenzionální oblasti. Jejich rozšíření na třídimenzionální problém je možné.

Navržené modely jsou založeny na smíšené hybridní formulaci. Pro jejich aproximaci byla zvolena metoda konečných prvků. Aproximace úlohy vede na řešení matice lineárních algebraických rovnic s rozsáhlou symetrickou řídkou maticí. Nutno podotknout, že dimenze soustavy je výrazná zejména v případě modelování piezoelektrických vlastností. Právě problematika formulace, aproximace a generování stavové matice soustavy navržených modelů je stěžejní částí práce a je jedním z hlavních výsledků a přínosů. Zajímavá je v tomto ohledu především mechanická část, ve které je nutno pro modely založené na smíšené formulaci generovat báze prostoru tenzorových funkcí. Problematika volby vhodné báze je sama o sobě velmi obsáhlá.

Součástí práce byla rovněž počítačová implementace navržených modelů a jejich otestování na základních úlohách. Kapitoly předloženého textu věnované této problematice jsou vedeny s ohledem na přiměřenou stručnost a přehlednost. Cílem jednotlivých simulací je reálné ověření vhodnosti či nevhodnosti té které zvolené aproximace.

Odvozené matematické modely poskytují prvotně výpočet příslušných fyzikálních veličin ve vzorku modelovaného materiálu. Umožňují rovněž simulaci těchto

veličin ve vzorcích s nabitými doménovými stěnami. To samo o sobě může mít velký význam při dalším studiu chování feroelektrických materiálů. Na základě implementovaných modelů je možné vystavět modely chování feroelektrických struktur, popřípadě modely řešící závislost efektivních vlastností materiálu na vnějším působení.

Modely zahrnují dielektrické, elastické, piezoelektrické vlastnosti a předpokládají jejich linearitu. Nutno podotknout, že feroelektrické látky vykazují další významnou závislost polarizace a to závislost polarizace na teplotě. Tato závislost v modelech není uvažována. Lze je tedy použít pro případ modelování příslušných dějů za izotermických popřípadě adiabatických podmínek. Zobecnění modelů i na případy nesplňující uvedené podmínky je možné a bude předmětem další práce. Pro tento případ by bylo nutné doplnit programový nástroj i o model vedení tepla a teplotu jako další stavovou veličinu zahrnout do modelů.

Nutno dodat, že i přes rozsah vykonaných prací zůstávají některé problémy otevřené a budou předmětem dalšího bádání. Jedná se především o uvážení geometrických změn na vzorku například uvážení posunu či ohybu stěny. Tyto změny zavedou do modelu geometrickou nelinearitu a ta zvýší nároky na řešiče generovaných soustav lineárních rovnic. Je vhodné podotknout, že i pro některé úlohy řešené v této práci byla konvergence poskytnutých řešičů na tolik pomalá, že nebylo možné další zjemňování použitých sítí. Tedy pro další rozvoj modelů bude nutný i další výzkum a vývoj v oblasti speciálních řešičů indefinitních soustav rovnic.

Konečně řešerše při hledání vhodných prostorů tenzorových funkcí prokázala, že i v této oblasti je řada otevřených otázek. Především při návrhu konkrétních báзовých funkcí. V práci byly postupně prozkoumány tři typy lineárních tenzorových funkcí a testovány jejich aproximační vlastnosti. Avšak z hlediska významu modelů založených na smíšené hybridní formulaci by bylo vhodné prověřit další možnosti pro generování tenzorových funkcí.

Závěrem chci poděkovat svému školiteli Doc. Dr. Ing. Jiřímu Maryškovi za odborné vedení mé práce, Prof. RNDr. Janu Fouskovi, DrSc. za oborné konzultace týkající se především fyzikálních vlastností studovaných materiálů a kolektivu Ústavu informatiky AV ČR za poskytnutí řešiče pro výpočet soustavy stavových rovnic. Tato práce by rovněž nikdy nevznikla bez laskavé podpory mých kolegů a trpělivosti mých nejbližších, i jim z celého srdce děkuji.

Literatura

- [1] AMARA, M., THOMAS, J. M.: *Equilibrium finite elements for the linear elasticity problem*. Numer. Math. 33, 367-383(1979).
- [2] ARNOLD, D. N., DOUGLAS, J. R., GUPTA, C. P.: *A family of higher order mixed finite element methods for plane elasticity*. Numer. Math 45, 1-22 (1984).
- [3] ARNOLD, D. N., FALK, R. S.: *A new mixed formulation for elasticity*. <http://www.ima.umn.edu/~arnold/publications.html> .
- [4] BRDIČKA, M., SAMEK, L., BRUNO, S. *Mechanika kontinua*. Academia, Praha, 2000.
- [5] BREZZI, F., FORTIN, M.: *Mixed and Hybrid Finite Element Method*. Springer-Verlag, New York, 1991.
- [6] BREZZI, F.: *On the existence, uniqueness, and approximation os saddle-point problems arising from Lagrangian multipliers*. RAIRO Anal. Numér. 2, 1974, 129-151.
- [7] CIARLET, P. G., LIONS, J. L.: *Handbook of Numerical Analysis. Volume II: Finite Element Methods (Part 1)*. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1991.
- [8] CIARLET, P. G., LIONS, J. L.: *Handbook of Numerical Analysis. Volume IV: Finite Element Methods (Part 2), Numerical Methods for Solids (Part 2)* ELSEVIER, Amsterdam, 1996.
- [9] CIARLET, P. G.: *The Finite Element Method for Elliptic Problems*. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1978.
- [10] DOMÍNGUEZ, M. C., FERRAGUT, L.: *Adaptive multigrid method using duality in plane elasticity*. Int. J. Numer. Meth. Engng. 50, 95-118.
- [11] FARHLOUL, M., FORTIN, M.: *Dual hybrid methods for the elasticity and the Stokes problems: a unified approach*. Numer. Math. 76, 419-440 (1997).
- [12] HASLINGER, J.: *Metoda konečných prvků pro řešení eliptických rovnic a nerovnic*. Státní pedagogické nakladatelství, Praha, 1980.

- [13] HORÁK, Z., KRUPKA, F., ŠINDELÁŘ, V.: *Technická fyzika* SNTL, Praha, 1961.
- [14] JOHNSON, C., MERCIER, B.: *Some equilibrium finite element methods for two-dimensional elasticity problem*. Numer. Math. 30, 103-116 (1978).
- [15] KAASSCHIETER, E. F., HUIJBEN, A. J. M.: *Mixed-hybrid finite elements and streamline computation for the potential flow problem*. TNO Institute of Applied Geoscience, Delft, 1990.
- [16] KOVALEV, S., SAKAI, M.: *Numerical Modeling of Electro-elastic Field in Ferroelectric Crystal Containing 90° Twin Boundary*. Acta mater. Vol 46, No. 9, pp. 3015-3026, 1998.
- [17] KRÁLOVCOVÁ, J., MARYŠKA, J.: *Model of Influence of External Electric Field on Domain Wall in Ferroelectrics*. Proceedings of SIMONA 2003, pp. 57-64, Liberec, Czech Republic, 2003.
- [18] KRÁLOVCOVÁ, J., MARYŠKA, J.: *Numerical Model of Influence of External Electric Loading on Electro-Elastic Field in Ferroelectrics*. Proceedings of UFFC 2004, p. 652, Montreal, Canada, 2004, (zasláno k publikování).
- [19] KRÁLOVCOVÁ, J., MARYŠKA, J., NOVÁK, J.: *Numerical Model of Electro-Elastic Field in Ferroelectrics Based on Mixed-Hybrid Finite Element Method*. Proceedings of ECAPD 2004, p. 130, Liberec, Czech Republic, 2004, (zasláno k publikování).
- [20] KUFNER, A., JOHN, O., FUČÍK, S.: *Function spaces*. Academia, Praha, 1977.
- [21] MARYŠKA, J., ROZLOŽNÍK, M., TŮMA, M.: *Shur complement systems in the mixed-hybrid finite element approximation of the potential fluid flow problem*. SIAM J. Sci. Comput. 22, 2000, pp. 704-723.
- [22] MENDELS, D. A.: *An introduction to modelling of piezoelectric thin films*. Web publication.
- [23] MIRANDA, S., UBERTINI, F.: *On the consistency of finite element models in thermoelastic analysis*. Comput. Methods Appl. Mech. Engng. 190, 2411-2427 (2001).
- [24] NEČAS, J., HLAVÁČEK, I.: *Úvod do matematické teorie pružných a pružně plastických těl*. SNTL, Praha, 1957.
- [25] NYE, J. F.: *Physical Properties of Crystals: Their Representation by Tensors and Matrices*. Oxford Sci., 1957.

- [26] PEREIRA, E. M. B. R., FREITAS, J. A. T.: *A mixed-hybrid finite element model based on orthogonal functions*. Int. J. for Num. Methods in Engineering 39, 1295-1312 (1996).
- [27] REKTORYS, K. *Přehled užité matematiky I, II, sedmé vydání*. Nakladatelství Prometheus, Praha, 2000.
- [28] REKTORYS, K.: *Variační metody v inženýrských problémech a v problémech matematické fyziky*. Academia, Praha, 1999.
- [29] TEIXEIRA DE FREITAS, J. A.: *Hybrid finite element formulations for elastodynamic analysis in the frequency domain*. Int. J. of Solids and Structures 36 (1999) , 1883-1923.
- [30] UCHINO K.: *Ferroelectric Devices*. Marcel Dekker, New York, 2000.
- [31] ZELENKA J.: *Piezoelektrické rezonátory a jejich použití v praxi*. Academia, Praha, 1981.

Příloha A

Na přiloženém disku jsou:

1. Soubor **DP_JK_04.PDF** obsahující text disertační práce ve formátu PDF.
2. Adresář **FERROM** obsahující počítačovou aplikaci vyvíjenou pro účely testování modelů.
3. Adresář **MESM** obsahující soubory sítí používané při výpočtu testovacích úloh.
4. Adresář **ZDROJE** obsahující zdrojové soubory modelu.